



**INSTYTUT KATALIZY  
I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI  
POLSKA AKADEMIA NAUK**

**SPRAWOZDANIE  
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU  
W ROKU 2007**



**Kraków, luty 2008**

## **SPIS TREŚCI**

|   |            |
|---|------------|
| Charakterystyka i kierunki badawcze Instytutu             | <b>5</b>   |
| Zadania badawcze realizowane w roku 2007                  | <b>9</b>   |
| Synteza najważniejszych osiągnięć Instytutu w roku 2007   | <b>15</b>  |
| Omówienie zadań badawczych realizowanych w roku 2007      | <b>21</b>  |
| Działalność statutowa Instytutu                           | <b>23</b>  |
| Projekty badawcze własne                                  | <b>69</b>  |
| Projekty badawcze promotorskie                            | <b>91</b>  |
| Projekty badawcze habilitacyjne                           | <b>105</b> |
| Projekty badawcze POL POST DOC                            | <b>109</b> |
| Projekty badawcze zamawiane                               | <b>115</b> |
| Krajowe sieci badawcze                                    | <b>121</b> |
| Projekty 6. Programu Ramowego UE                          | <b>135</b> |
| Projekty EU COST Action                                   | <b>137</b> |
| Projekty EOG  | <b>143</b> |
| Inne międzynarodowe projekty badawcze                     | <b>147</b> |
| Projekty Funduszy Strukturalnych UE                       | <b>155</b> |
| Współpraca z innymi instytucjami i przemysłem w roku 2007 | <b>161</b> |
| Dorobek naukowy Instytutu za rok 2007                     | <b>163</b> |
| Publikacje naukowe ogłoszone drukiem                      | <b>163</b> |
| Udział w konferencjach i zebraniach naukowych             | <b>201</b> |
| Raport International Advisory Board                       | <b>235</b> |
| Wypis z protokołu posiedzenia Rady Naukowej Instytutu     | <b>237</b> |



# CHARAKTERYSTYKA I KIERUNKI BADAWCZE INSTYTUTU KATALIZY I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI PAN

## Od teorii do eksperymentu i zastosowań

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie jest jedyną w Polsce instytucją naukową i jedną z ośmiu na świecie całkowicie poświęconych badaniom w zakresie katalizy i fizykochemii powierzchni. Instytut prowadzi interdyscyplinarne badania zjawisk zachodzących na granicach fazowych gaz - ciało stałe, gaz - ciecz i ciecz - ciało stałe, łączące istotne aspekty chemii, fizyki, technologii chemicznej, inżynierii materiałowej a ostatnio także biologii i medycyny. Instytut łączy podstawowe studia teoretyczne i doświadczalne z badaniami o charakterze stosowanym, mającymi zastosowanie w procesach technologicznych.

W Instytucie zatrudnionych jest 112 pracowników, w tym 48 na stanowiskach naukowych. W badaniach uczestniczy też 22 doktorantów.

W roku 2007 (z perspektywą kontynuowania w kolejnych latach) wykonywano następujące tematy działalności statutowej Instytutu:

1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów katalitycznych
2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju
3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy
4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów
5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe
6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

Instytut posiada dobre, w niektórych przypadkach unikatowe w skali krajowej, zaplecze aparaturowe, niezbędne do realizowania tak szeroko zakrojonej tematyki badawczej. W miarę potrzeb i możliwości udostępniane jest ono również innym placówkom naukowym. W badaniach wykorzystywana jest także aparatura wspólnych laboratoriów międzyinstytutowych: Centrum Badania Powierzchni i Nanostruktur, Międzyinstytutowego Laboratorium Katalizy i Biotechnologii Enzymatycznej oraz Polsko-Ukraińskiego Laboratorium Katalizy. Szeroka współpraca z czołowymi ośrodkami naukowymi w kraju i zagranicą pozwala także na dostęp do innej, wysoko wyspecjalizowanej aparatury pomocnej w wykonaniu planowanych zadań.

Działalność badawcza Instytutu jest bardzo szeroka i wszechstronna. Obejmuje projektowanie, syntezę, testowanie oraz praktyczną weryfikację nowych, zaawansowanych materiałów i procesów. W zakresie katalizy heterogenicznej główny wysiłek ukierunkowany jest na rozwijanie nowych, "inteligentnych" materiałów o dobrze zdefiniowanej strukturze i właściwościach dostosowanych do konkretnych reakcji katalitycznych. Badane materiały to m.in układy tlenkowe o nowych składach i strukturach, materiały nieorganiczne i organiczne o kontrolowanym systemie porów, układy metalicznych nanocząstek na nośnikach, a także odpowiadające im układy modelowe na dobrze zdefiniowanych powierzchniach monokryształów oraz nowe materiały magnetyczne. Procesy katalityczne stanowiące przedmiot badań wpisują się w nurt „chemii zielonej” i są optymalizowane pod kątem obniżenia energochłonności i wyeliminowania lub ograniczenia produktów ubocznych. Przykładem są reakcje selektywnego utleniania i uwodorniania, utleniającego odwodorniania, izomeryzacji węglowodorów, jak również szeroko badane również procesy usuwania

szkodliwych zanieczyszczeń powietrza. Opis badanych reakcji obejmuje także ich kinetykę i mechanizm. Badania w zakresie katalizy homogenicznej i enzymatycznej skoncentrowane są na układach bioaktywnych i bionaśladowczych.

Prace badawcze w zakresie fizykochemii powierzchni układów zdyspergowanych są ukierunkowane na wyjaśnienie mechanizmu tworzenia i stabilności pian, nanocząstek i cząstek koloidalnych i ich oddziaływań, mikroenkapsulacji i biokompatybilności materiałów. Znaczna część badań poświęcona jest różnym aspektom opisu zjawiska adsorpcji. Aspekt aplikacyjny obejmuje m.in. wytwarzanie innowacyjnych materiałów biomedycznych, takich jak nośniki leków lub podstawowe elementy testów diagnostycznych, oraz fizykochemiczną modyfikację powierzchni tworzyw używanych do produkcji implantów lub stentów w celu poprawy ich tolerowania przez organizm.

Prace eksperymentalne są prowadzone w ścisłym związku z badaniami teoretycznymi, w których wykorzystywane są metody chemii kwantowej i modelowanie metodami fizyki ciała stałego, jak również metody mechaniki molekularnej i techniki symulacji Monte Carlo. Zakres badań obejmuje wyjaśnianie mechanizmów reakcji katalitycznych, modelowanie struktur tlenków metali przejściowych, materiałów kompozytowych oraz centrów aktywnych w enzymach, a także opis adsorpcji sufraktantów na powierzchniach międzyfazowych ciecz - gaz i ciecz - ciecz oraz symulacje adsorpcji cząstek polimerowych na homogenicznych i heterogenicznych powierzchniach ciał stałych.

Ważnym kierunkiem badań jest ochrona dziedzictwa kultury, w ramach której prowadzone są studia nad strukturą i właściwościami historycznych materiałów budowlanych i dekoracyjnych, oraz dokonywana jest analiza niszczącego oddziaływania środowiska na zabytki architektury i dzieła sztuki. Pozwala to na zapobieganie niszczeniu zabytkowych obiektów oraz na udoskonalanie materiałów i metody konserwatorskich.

Rezultatem badań prowadzonych w Instytucie, oprócz dokonań poznawczych, są także osiągnięcia aplikacyjne. Od wielu lat jedną ze specjalności Instytutu stanowi katalityczne usuwanie zanieczyszczeń środowiska. Instytut może się w tej dziedzinie poszczycić zarówno patentami na katalizatory, jak i rozwiązania technologiczne. Jednym z nich jest proces „Swingtherm”, pozwalający na eliminację toksycznych wyziewów przemysłowych poprzez ich spalanie do nieszkodliwych produktów, przy minimalnym nakładzie energetycznym. Licencja na to rozwiązanie technologiczne została sprzedana do wielu zakładów w Polsce, Europie, Kanadzie, Chinach i Japonii. Aby wzmocnić transfer innowacji do praktyki, w roku 1995 utworzona została spółka typu spin-off "Katalizator" w celu rozwoju przemysłowych zastosowań układów katalitycznych opracowanych i opatentowanych w Instytucie. W 2006 roku zostało utworzone, dzięki finansowaniu z funduszy Sektorowych Programów Operacyjnych, nowe laboratorium "Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ".

Wiele dokonań praktycznych ma na swoim koncie grupa zajmująca się ochroną dziedzictwa kultury. Przykładem może być rozpoznanie przyczyn kondensacji pary wodnej niszczącej rzeźby solne w historycznej Kopalni Soli w Wieliczce, dzięki czemu wdrożono tam system klimatyzacji, który całkowicie wyeliminował istniejące zagrożenia. Z kolei badania nad cementami romańskimi, używanymi do dekoracji budowli XIX i początku XX wieku przywróciły wytwarzanie i stosowanie tego materiału w praktyce konserwatorskiej. Ilustracją tego jest odrestaurowany gmach dawnej Akademii Handlowej w Krakowie, stanowiący pierwszą w Europie renowację sztukaterii romańskich. Ostatnio, dzięki poznaniu mechanizmu niszczenia wczesnochrześcijańskich malowideł w Grocie św. Pawła w Efezie, opracowano plan zahamowania zniszczeń przez zastosowanie kontrolowania mikroklimatu wewnątrz groty.

## **Kształcenie**

Instytut jest wiodącą instytucją tworzącą Międzynarodowe Studium Doktoranckie (wraz z Wydziałem Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej i Wydziałem Chemicznym Politechniki Rzeszowskiej). Studium liczy obecnie 51 słuchaczy. W ramach współpracy z Uniwersytetem Jagiellońskim w Instytucie realizowane są u prace licencjackie i magisterskie z chemii i ochrony środowiska.

## **Współpraca krajowa**

Instytut szczyci się wieloletnią tradycją w organizacji i koordynowaniu badań w zakresie katalizy i chemii powierzchni w Polsce. Od czterdziestu lat Instytut organizuje cieszące się wielką popularnością w środowisku naukowym, coroczne Ogólnopolskie Kolokwia Katalityczne. Instytut koordynuje prace sieci badawczych "EKO-KAT - Innowacyjne materiały katalityczne w ochronie ekosystemu", "SURUZ - Surfaktanty i układy zdyspergowane w teorii i praktyce" i "MANAR - Nowe materiały warstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności", oraz bierze udział w pracach sieci badawczej "Nowe materiały – Nanomateriały do zastosowań w technice i medycynie", Polskiej Platformy Technologicznej Zrównoważonej Chemii, Małopolskiej Sieci Centrów Doskonałości "Międzyregionalna Sieć Centrów Badawczych Materiałów dla Nowych Technologii", Kłastrze Life-Science, Konsorcjum "Kataliza w ochronie środowiska: usuwanie zanieczyszczeń ze środowiska, energia odnawialna i czysta energia", Konsorcjum Nanotech, Małopolskim Kłastrze Technologii Informacyjnych, Małopolsko-Podkarpackim Kłastrze Czystej Energii.

Dla rozwoju interdyscyplinarnych badań Instytut utworzył wspólne laboratoria: "Centrum Badania Powierzchni i Nanostruktur" (z Wydziałem Fizyki i Techniki Jądrowej Akademii Górniczo Hutniczej i Wydziałem Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej) oraz "Międzyinstytutowe Laboratorium Katalizy i Biotechnologii Enzymatycznej (z Instytutem Fizjologii Roślin PAN i Wydziałem Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego). Instytut jest współzałożycielem Narodowego Laboratorium Badania Powierzchni (wspólnie z Instytutem Chemii Fizycznej PAN).

## **Współpraca międzynarodowa**

Instytut jest szeroko zaangażowany we współpracę z zagranicznymi ośrodkami naukowymi. Uczestniczy w ponad 40 porozumieniach o współpracy dwustronnej oraz w wielu projektach badawczych Unii Europejskiej. Współpraca z Narodową Akademią Nauk Ukrainy doprowadziła do utworzenia w 1993 roku wspólnego Ukraińsko-Polskiego Laboratorium Katalizy zlokalizowanego w Krakowie i Kijowie.

W latach 2002-2006 Instytut posiadał status Centrum Doskonałości UE "CATCOLL - The Krakow Research Centre for Molecular Catalysis and Soft Matter Chemistry". Działalność CATCOLL wpłynęła na polepszenie integracji z europejską społecznością naukową przez organizację wykładów znanych naukowców, wizyt studyjnych w Polsce oraz wyjazdów słuchaczy studium doktoranckiego na staże do uznanych europejskich centrów badawczych.

Od roku 2005 Instytut jest koordynatorem projektu UE Transfer of Knowledge "ToK-CATA Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts". Projekt realizowany jest we współpracy z University of Nottingham, Consejo Superior de Investigaciones Cientificas, University of Stuttgart, Humboldt University, University of Lund. Projekt realizowany jest poprzez długoterminowe staże przyjazdowe i wyjazdowe naukowców partnerskich instytucji, a celem jest opracowanie i synteza katalizatorów porowatych o właściwościach niezbędnych dla realizacji konkretnych reakcji katalitycznych.

Instytut zaangażowany jest także w prace dwóch innych europejskich sieci badawczych "IDECAT - Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production" i "ACENET - Applied Catalysis European Network". IDECAT jest projektem typu sieci doskonałości realizowanym od 2005 roku w ramach 6. Programu Ramowego UE i koordynowany jest przez Consorzio Interuniversitario per la Scienza e Tecnologia dei Materiali we Włoszech. Jednoczy 37 laboratoriów z 17 instytutów w 11 krajach (Włochy, Belgia, Czechy, Irlandia, Francja, Polska, Hiszpania, Szwecja, Szwajcaria, Holandia, i Wielka Brytania). Celem projektu IDECAT jest osiągnięcie trwałej integracji pomiędzy głównymi europejskimi instytucjami badawczymi w dziedzinie katalizy heterogenicznej, homogenicznej, biokatalizy przez utworzenie spójnych ram współpracy w zakresie badań, know-how, szkoleń, promocji nauki, rozpowszechnianie umiejętności i transfer technologii pomiędzy różnymi grupami naukowymi z dziedziny katalizy.

ACENET jest projektem typu ERA-NET 6. Programu Ramowego UE i jest realizowany od 2004 roku. W ramach projektu współpracują krajowe organizacje zarządzające nauką i/lub finansujące badania naukowe z 10 krajów Holandia-koordynator, Francja, Niemcy, Grecja, Irlandia, Włochy, Polska, Portugalia, Hiszpania, i Wielka Brytania). Podstawowym celem projektu jest osiągnięcie spójności i koordynacja narodowych programów i polityki naukowej w zakresie katalizy stosowanej. Instytut odpowiada w programie za zadania związane z kształceniem w zakresie nauki o katalizie.

Instytut realizuje obecnie 17 projektów europejskich, w tym 2 projekty Europejskiego Obszaru Gospodarczego, 4 projekty UE COST Action i 2 projekty ERA-NET. Realizowane są także 3 projekty Sektorowych Programów Operacyjnych współfinansowanych przez Komisję Europejską. Do konkursów ogłoszonych w ramach 7. Programu Ramowego zgłoszono 11 propozycji projektów, 3 z nich znajdują się w fazie negocjacji kontraktów.

### **Popularyzacja nauki**

Przekonanie, że upowszechnianie wśród społeczeństwa informacji o badaniach prowadzonych w laboratoriach naukowych jest niezbędnym warunkiem budowania aprobaty społecznej dla inwestycji dokonywanych w sferze nauki, zarówno przez instytucje państwowe, jak i prywatne, znalazło odzwierciedlenie w inicjatywach na rzecz popularyzacji osiągnięć naukowych. Każdego roku Instytut organizuje Dni Otwarte, podczas których goście mogą wysłuchać wykładów popularnonaukowych, uczestniczyć w widowiskowych eksperymentach przeprowadzanych w laboratoriach i zaznajomić się z profilem badawczym Instytutu. Dni Otwarte, skierowane są przede wszystkim do uczniów szkół ponadpodstawowych. O ich popularności wśród krakowskich szkół świadczy fakt, że corocznie odwiedza Instytut ok. 1000 osób.

Inne formy działalności popularyzacyjnej to aktywny udział w organizacji corocznego Festiwalu Nauki na Rynku Głównym w Krakowie, oraz udział pracowników Instytutu w audycjach radiowych i telewizyjnych poświęconych sprawom nauki. W roku 2007 był to reportaż z prac grupy ochrony zabytków wyświetlany w TV EuroNews w prestiżowym programie Futuris, a także audycje radiowe w Polskim Radiu Kraków i w ogólnopolskim radiu akademickim Flash.

# ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2007

## DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

|  |    |
|--|----|
| <b>1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów katalitycznych</b>   |    |
| 1.1. Nanostrukturalne materiały węglowe o strukturze grafitu jako nośniki metali przejściowych w elektrokatalizie. Preparatyka nanoszenia katalizatora i testowanie jego właściwości katalitycznych                              | 25 |
| 1.2. Monodispersyjne, koloidalne zawiesiny nanokryształów zeolitów i ich wykorzystanie jako prekursorzy w preparatyce nowych układów dla procesów katalitycznych i rozdziału   | 26 |
| 1.3. Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały warstwowe; synteza i badania strukturalne  | 27 |
| 1.4. Tlenkowe i metaliczne nanostruktury na powierzchni: wytwarzanie, struktura i dynamika, właściwości elektronowe, reaktywność   | 28 |
| 1.5. Badanie właściwości fizykochemicznych i katalitycznych układów pallad-żywicę mikro- i makroporowate   | 29 |
| 1.6. Materiały mezoporowate jako nanoreaktory katalityczne   | 30 |
| <b>2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju</b>  |    |
| 2.1. Optymalizacja warunków preparatyki nośników na podstawie spineli chromowych $M\text{Cr}_2\text{O}_4$ i składu katalizatorów $\text{Au}/M\text{Cr}_2\text{O}_4$ do reakcji utleniania związków z ochroną środowiska          | 33 |
| 2.2. Utleniające odwodornienie izobutanu na katalizatorach $\text{CrO}_x/\text{nośnik tlenkowy}$ ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ , $\text{TiO}_2$ ): wpływ potasu na właściwości tlenu katalizatora i chemisorpcję tlenu molekularnego | 34 |
| 2.3. Kinetyka syntezy eteru etylo-tert-butyłowego (ETBE) z etanolu i izobutenu w układzie uwodnionym   | 35 |
| 2.4. Rozpoznawcze badania wytwarzania biopaliwa w procesie transestryfikacji: wstępny dobór katalizatorów  | 36 |
| 2.5. Katalityczne transformacje gliceryny dla jej utylizacji jako produktu ubocznego przy produkcji biopaliw   | 37 |
| 2.6. Synteza i badanie właściwości elektrochemicznych heteropolikwasów – katalizatorów do procesów utleniania węglowodorów   | 38 |
| 2.7. Synteza i badanie właściwości katalitycznych makrocyclicznych kompleksów salenowych w procesie utleniania węglowodorów  | 39 |
| 2.8. Katalityczne utlenianie sadzy samochodowej, c.d.  | 40 |
| 2.9. Stałe superkwasy oraz nowe perokso- związki $\text{Mo(VI)}$ , $\text{W(VI)}$ i $\text{V(V)}$ , synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne  | 41 |
| 2.10. Synteza i właściwości nowych katalizatorów zeolitycznych do procesów transformacji węglowodorów alkiloaromatycznych i terpenowych  | 42 |
| 2.11. Spalanie zanieczyszczeń organicznych na katalizatorach otrzymanych z minerałów warstwowych   | 43 |
| 2.12. Uruchomienie wysokociśnieniowej aparatury do syntezy metanolu z gazu syntezowego i $\text{CO}_2$   | 44 |
| <b>3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy</b>  |    |
| 3.1. Badania korelacji aktywność katalityczna a struktura katalizatora na przykładzie układów porfiryńowych  | 47 |



|  |    |
|--|----|
| 3.2. Adsorpcja atomów i cząsteczek na powierzchniach tlenków metali przejściowych. Modelowanie metodami chemii kwantowej         | 48 |
| 3.3. Pomiary kinetyczne i opracowanie modelu kinetycznego reakcji utleniającego odwodornienia propanu na katalizatorach V-Mg-O   | 49 |
| 3.4. Symulacje komputerowe kinetyki adsorpcji jonów wodorowych na granicy faz tlenek metalu/elektrolit                           | 50 |
| 3.5. Opis teoretyczny kinetyki procesów sorpcji stosowanych w technologiach ochrony środowiska                                   | 51 |
| 3.6. Badania wpływu struktury fraktalnej powierzchni na dynamikę transportu w układach gaz/ciało stałe                           | 52 |
| 3.7. Strukturalne i elektronowe uwarunkowania właściwości metalicznych centrów aktywnych w enzymach – badania kwantowo-chemiczne | 53 |
| 3.8. Właściwości strukturalne i elektronowe metalicznych centrów aktywnych w materiałach nanoporowatych                          | 54 |

#### **4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów**

|   |    |
|---|----|
| 4.1. Wpływ kąta kolizji i szorstkości powierzchni hydrofobowej na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego                    | 57 |
| 4.2. Określenie kinetyki tworzenia oraz struktury monowarstw cząstek koloidalnych oddziaływujących potencjałem krótkozasięgowym | 58 |

#### **5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe**

|  |    |
|--|----|
| 5.1. Określenie korelacji pomiędzy konformacją i kształtem nanocząstek na powierzchniach, a potencjałem elektrokinetycznym | 61 |
| 5.2. Adsorpcja jonowych surfaktantów na ciekłych powierzchniach  | 62 |
| 5.3. Elektroaktywne cienkie warstwy polimerowe z wbudowanymi nanostrukturami węglowymi                                     | 63 |

#### **6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury**

|   |    |
|---|----|
| 6.1. Określenie zagrożeń drewna w budowlach zabytkowych na skutek infiltracji wody opadowej | 67 |
|---|----|

### **PROJEKTY BADAWCZE (GRANTY) KBN**

#### **Projekty badawcze własne**

|  |    |
|--|----|
| 1. 3 T09A 092 29 [2005-2009] Wpływ położenia metalu przejściowego w strukturze heteropolizwiązku na jego aktywność katalityczną i na mechanizm reakcji utleniania węglowodorów cyklicznych | 71 |
| 2. 3 T09B 091 29 [2005-2009] Zastosowanie makrocyklicznych kompleksów metali przejściowych: metaloporfiryn, metaloftalocyjanin i metalosalenów do katalitycznego utleniania propylenu      | 72 |
| 3. 3 T09B 066 26 [2004-2007] Mezoporowate nośniki krzemionkowe jako narzędzie do sterowania procesami katalizowanymi przez makrocykliczne metalokompleksy                                  | 73 |
| 4. 3 T08D 045 29 [2005-2007] Określenie mechanizmów fizykochemicznych tworzenia wielowarstwowych nanomateriałów ceramicznych o podwyższonej biokompatybilności                             | 74 |
| 5. 2 P04A 042 26 [2004-2006] Struktura i aktywność enzymatyczna syntazy kwasu klawaminowego: teoretyczne badanie mechanizmu reakcji katalitycznej  | 75 |

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 6.  | 3 T09A 164 27 [2004-2006] Dynamiczne struktury adsorpcyjne - wpływ substancji powierzchniowo aktywnej na zmiany ruchliwości powierzchni międzyfazowej   | 76 |
| 7.  | 3 T09A 029 29 [2005-2008] Membrany na bazie zeolitów typu MFI, FAU i BEA jako nowe nanomateriały dla procesów rozdziału mieszanin węglowodorów  | 77 |
| 8.  | 1 T09A 094 30 [2006-2009] Badania efektywności aktywacji wodorowej naniesionych katalizatorów na osnowie cząstek złota  | 78 |
| 9.  | 1 T09A 123 30 [2006-2009] Mechanizmy tworzenia multiwarstw o kontrolowanej mikroarchitekturze na powierzchniach metalicznych  | 79 |
| 10. | 1 T09A 122 30 [2006-2009] Wpływ kadmu i selenu na właściwości powierzchniowe modelowych warstw lipidowych preparowanych na bazie naturalnych błon komórkowych   | 80 |
| 11. | N204 024 31/0475 [2006-2008] Teoretyczne badania heterogeniczności powierzchni katalizatorów na bazie tlenków wanadu  | 81 |
| 12. | N204 166 31/3734 [2006-2009] Struktura, właściwości powierzchniowe i przepuszczalność wielowarstwowych filmów polielektrolitów dla zastosowań w modyfikacji powierzchni i enkapsulacji substancji chemicznych | 82 |
| 13. | N204 164 31/3689 [2006-2009] Heteropolikwasy jako katalizatory w reakcji syntezy eteru tert-butyłowego (ETBE) w fazie gazowej   | 83 |
| 14. | N204 034 31/0795 [2006-2008] Teoretyczny opis aktywacji tlenu i reaktywności różnych centrów tlenowych w hetero- i homogenicznych molibdenowych układach katalitycznych                                       | 84 |
| 15. | N205 022 31/1112 [2006-2009] Nowa metoda wytwarzania nośników nano- oraz mikrokapsularnych o określonej funkcjonalności do selektywnego dostarczania reagentów  | 85 |
| 16. | N204 089 32/2633 [2007-2010] Mechanizm działania katalizatorów "nano-Au/tlenek" w reakcjach utleniania CO   | 86 |
| 17. | N204 166 32/4313 [2007-2009] Otrzymywanie mezoporowatych struktur typu SBA-15 o hierarchicznym systemie porów, przy użyciu nanocząstek węgla lub lateksu, jako szablonów strukturalnych                       | 87 |
| 18. | N204 122 32/3142 [2007-2010] Zastosowanie makrocyklicznych kompleksów metali przejściowych w samoorganizujących się układach do katalitycznych procesów utleniania węglowodorów                               | 88 |
| 19. | N N204 1494 33 [2007-2010] Wpływ atomu centralnego (P, Si) oraz atomu addenda (W, Mo) w solach srebrowych heteropolikwasów o strukturze Keggina na bezpośredni rozkład tlenków azotu NO <sub>x</sub>          | 89 |

### **Projekty badawcze promotorskie**

|    |  |    |
|----|--|----|
| 1. | 3 T09A 167 29 [2005-2007] Porównanie właściwości katalitycznych metaloporfiryn i ich $\mu$ -oxo-kompleksów w procesach utleniania węglowodorów   | 93 |
| 2. | 3 T09A 145 29 [2005-2008] Mechanizm oddziaływania cząstek koloidalnych z powierzchniami heterogenicznymi wyznaczony przy pomocy badań adsorpcji oraz zjawisk elektrokinetycznych                 | 94 |
| 3. | 3 T09D 010 28 [2005-2007] Mechanizm działania katalizatora rodowego do rozkładu tlenku diazotu w gazach emitowanych do środowiska  | 95 |
| 4. | 1 H01E 010 30 [2006-2007] Emisja akustyczna drewna w obiektach zabytkowych pod wpływem fluktuacji mikroklimatu (promotorski)   | 96 |
| 5. | N204 162 31/3659 [2006-2008] Nowe metody syntezy kryształów zeolitów typu MFI, FAU i BEA multimodalnym systemem porów i ich wykorzystanie jako nowych nanomateriałów dla procesów katalitycznych | 97 |

|   |     |
|---|-----|
| 6. N205 048 31/2120 [2006-2008] Układy multimodalne o podwyższonych właściwościach kwasowych jako podstawa nowych układów katalitycznych  | 98  |
| 7. N204 180 31/3999 [2006-2008] Badanie właściwości centrów Cu(I) w zeolitach typu fojazytu i MFI i ich oddziaływań z cząsteczkami metodami chemii kwantowej i metodami hybrydowymi | 99  |
| 8. N204 012 31/0279 [2006-2008] Określenie czynników determinujących powstawanie kontaktu trójfazowego w czasach milisekundowych  | 100 |
| 9. N204 150 32/3822 [2007-2009] Określenie wpływu zaadsorbowanych polielektrolitów na kinetykę osadzania i topologię monowarstw cząstek   | 101 |
| 10. N N204 2145 33 [2007-2009] Osadzanie modelowych mikrokapsulek na powierzchniach metalicznych ]modyfikowanych przez adsorpcję multiwarstw polielektrolitów                       | 102 |
| 11. N N204 1238 33 [2007-2009] Transformacje węglowodorów terpenowych na katalizatorach zeolitowych   | 103 |

### **Projekty badawcze habilitacyjne**

|  |     |
|--|-----|
| 1. N204 173 31/3823 [2006-2008] Mechanizmy reakcji na mononuklearnych centrach żelazowych i manganowych w niehemowych enzymach aktywujących tlen | 107 |
|--|-----|

### **Projekty badawcze POL POST DOC**

|  |     |
|--|-----|
| 1. Epitaksjalne nanostruktury tlenkowe na metalicznych podłożach monokrystalicznych [2006-2009]  | 111 |
| 2. Ustalenie norm dopuszczalnych fluktuacji mikroklimatu dla drewna polichromowanego [2006-2009]   | 112 |
| 3. Nowe chiralne kompleksy Ru(II): synteza i zastosowanie w katalizie asymetrycznej w układach homogenicznych i heterogenizowanych na mezoporowatych nośnikach [2006-2009] | 113 |

### **Projekty badawcze zamawiane**

|   |     |
|---|-----|
| 1. PZB-KBN-116/T09/2004 [2005-2009] Nowe materiały katalityczne jako podstawa procesów chemicznych przyjaznych dla środowiska (KOORDYNACJA) | 117 |
| 2. PBZ-MEiN-2/2/2006 [2007-2010] Chemia perspektywicznych procesów i produktów konwersji węgla  | 119 |

### **KRAJOWE SIECI BADAWCZE**

|   |     |
|---|-----|
| 1. EKO-KAT Innowacyjne materiały katalityczne w ochronie ekosystemu (KOORDYNACJA)               | 123 |
| 2. MANAR Nowe materiały warstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności (KOORDYNACJA) |     |

### **ZAGRANICZNE PROJEKTY BADAWCZE**

#### **Projekty 6. Programu Ramowego UE**

|   |     |
|---|-----|
| 1. EC 6 <sup>th</sup> FP NMP4-CT-2003-001516 DYNASYNC [2004-2007] Dynamics in Nano-scale Materials Studied with Synchrotron Radiation (STREP-KOORDYNACJA) | 127 |
|---|-----|

|     |   |     |
|-----|---|-----|
| 2.  | EC 6 <sup>th</sup> FP MTKD-CT-2004-509832 TOK-CATA [2004-2008] Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts (ToK-KOORDYNACJA)  | 128 |
| 3.  | EC 6 <sup>th</sup> FP INCO-CT-2003-003355 SURUZ [2004-2006] Scientific Network "Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practise (SSA-KOORDYNACJA)                                      | 129 |
| 4.  | EC 6 <sup>th</sup> FP NMP-CT-2004-510318 POL-CAT [2004-2006] Annual Polish Conferences Are Setting Up a New Platform for Dissemination of Knowledge in the Field of Catalysis (SSA-KOORDYNACJA) | 130 |
| 5.  | EC 6 <sup>th</sup> FP NMP4-CT-2003-001428 NANOCAPS [2004-2007] Nanocapsels for Targeted Controlled Delivery of Chemicals (STREP)  | 131 |
| 6.  | EC 6 <sup>th</sup> FP SSPI-CT-3003-501837 NOAH'S ARK [2004-2007] Global Climate Change Impact on Built Heritage and Cultural Landscapes (STREP)   | 132 |
| 7.  | EC 6 <sup>th</sup> FP ERAC-011784 ACENET ERA-NET [2004-2008] ERA-NET for Applied Catalysis in Europe (CA)   | 133 |
| 8.  | EC 6 <sup>th</sup> FP NMP2-011730-2 IDECAT [2005-2009] Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production (NoE)  | 134 |
| 9.  | EC 6 <sup>th</sup> FP SSP-4 SSPI-CT-2004-022695 SENSORGAN [2006-2008] Sensor System for Detection of Harmful Environments for Pipe Organ (STREP)  | 135 |
| 10. | NANOMEDRART [2007-2010] Multifunctional Particulate System for Nanomedicine (w ramach projektu ERA-NET MATERA)  | 136 |

### **Projekty EU COST Action**

|    |  |     |
|----|--|-----|
| 1. | EC COST D36 [2006-2011] Molecular Structure-Performance Relationships at the Surface of Functional Materials |     |
| 2. | EC COST D43 [2006-2011] Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology                                   | 139 |
| 3. | EC COST IE0601 [2006-2011] Wood Science for Conservation of Cultural Heritage                                | 140 |
| 4. | EC COST P21 [2006-2010] Physics of Droplets  | 141 |

### **Projekty Mechanizmu Finansowego EOG**

|    |   |     |
|----|---|-----|
| 1. | PL0084 [2007-2010] NOMRemove Effective Photocatalytic-Membrane Methods of Removal of Organic Contaminants for Water Treatment | 145 |
| 2. | PL0086 [2007-2010] Establishing Standards for Allowable Microclimatic Variations for Polychrome Wood                          | 146 |

### **Inne międzynarodowe projekty badawcze**

|    |  |     |
|----|--|-----|
| 1. | GDRE Francja [2007-2010] Enzymes as Nanotools - Development of a New, Enzyme-Based Technology for Engineering Selectively Permeable, Nano-Structured Membranes               | 149 |
| 2. | ECO-NET 2007 Francja [2007-2008] IUP Casein Polyelectrolyte Multilayer Films   | 150 |
| 3. | GDRI Francja [2007-2010] Catalysis for Environmental Depollution, Renewable Energy and Clean Fuels   | 151 |
| 4. | Projekt Międzyrządowy Polski i Hiszpanii [2007-2009] Nanostructural Micro/Mesoporous Materials as a New Catalysts for the Production of Environmentally Friendly Diesel Fuel | 152 |
| 5. | NANO Japonia [2007-2008] The Development of a Substitute Ru Catalyst Based on Ni Catalyst by Improving Resistance for Carbon Deposition and Ni Sintering                     | 153 |

## **PROJEKTY FUNDUSZY STRUKTURALNYCH UE**

1. SPO WKP 1.4.1. [2005-2008] TECHKON Wdrożenie technologii cementu romańskiego do praktycznej konserwacji zabytków **157**
2. SPO WKP 1.4.2. [2006-2008] CeZaŚ Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska **158**
3. SPO WKP 1.4.1 [2007-2008] IGNIS Konserwatorskie systemy grzewcze dla zabytkowych kościołów **159**

## **SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘC INSTYTUTU W ROKU 2007**

### **W ROKU 2007:**

|                                |   |
|--------------------------------|---|
| realizowano:                   | 6 tematów statutowych – 32 zadania badawcze<br>36 projektów badawczych (grantów) KBN-MNiI-MEiN-MNiSzW<br>(w tym 11 promotorskich, 1 habilitacyjny, 2 zamawiane, 3 Pol Post Doc)<br>2 sieci naukowe (koordynowane przez Instytut)<br>10 projektów programów ramowych Unii Europejskiej<br>(w tym 4 projekty koordynowane przez Instytut)<br>2 projekty Mechanizmu Finansowego EOG<br>4 projekty UE COST Action<br>5 innych projektów międzynarodowych<br>3 projekty Funduszy Strukturalnych UE |
| opublikowano:                  | 1 monografię<br>1 podręcznik<br>2 rozdziały w monografiach<br>110 prac naukowych w czasopismach naukowych o cyrkulacji międzynarodowej<br>25 prac w innych w czasopismach o ograniczonej cyrkulacji oraz w pismach popularno-naukowych<br>32 prace w recenzowanych materiałach konferencyjnych<br>205 streszczeń referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych  |
| wydano nakładem Instytutu:     | 2 książkowe materiały konferencyjne (z nr ISBN)   |
| wyłożono i zaprezentowano:     | 132 referaty i komunikaty (w tym 27 referatów plenarnych i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 177 posterów   |
| uzyskano:                      | 1 patent krajowy  |
| we współpracy z zagranicą:     | realizowano 27 tematów<br>opublikowano 44 wspólne prace w czasopismach naukowych i 8 w recenzowanych materiałach konferencyjnych<br>ogłoszono 34 komunikaty w materiałach konferencyjnych<br>zrealizowano 178 wyjazdy pracowników Instytutu za granicę<br>z zagranicy przyjechało 40 osób   |
| zorganizowano:                 | 5 konferencji i posiedzeń naukowych<br>Dzień Otwarty Instytutu<br>stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki   |
| tytuł profesora:               | uzyskały 2 osoby (1 na UJ)  |
| stopień doktora habilitowanego | uzyskały 2 osoby  |
| stopień doktora:               | uzyskało 8 osób (1 na UJ i 1 na PK)   |

## **WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2007:**

**Patent "Sposób utleniania cykloheksanu"** wg zgłoszenia P-357583, udzielony 28. 12. 2007  
L. Matachowski, J. Połtowicz, K. Pamin, J. Haber, A. Janitz, K. Magielko, S. Szarlik,  
S. Piechota

Uzyskany patent dotyczy sposobu utleniania cykloheksanu według polskiej technologii CYKLOPOL, przy zastosowaniu opracowanego przez autorów nowego układu katalitycznego. Cykloheksan jest utleniany do cykloheksanolu i cykloheksanonu, ważnych półproduktów do otrzymywania tworzyw poliamidowych. Polska jest znaczącym producentem poliamidów, a 80-90% poliamidów jest produkowanych właśnie w oparciu o proces CYKLOPOL. Katalizator przemysłowy stosowany w tym procesie pozwala na uzyskanie 4% konwersji cykloheksanu przy selektywności do produktów pożądaných: cykloheksanonu i cykloheksanolu wynoszącej 75% oraz stosunku ketonu do alkoholu 1:2. Opatentowany sposób utleniania cykloheksanu przy zastosowaniu nowego układu katalitycznego będącego mieszaniną izooktanianu kobaltu i metaloporfiryny zwiększa, bez zmiany technologii, konwersję o 25% i selektywność do 85-90% zmieniając równocześnie stosunek ketonu do alkoholu na 2:1. Stosując ten katalizator można także obniżyć temperaturę procesu o 20°C w porównaniu do procesu przemysłowego.

### **Czujnik emisji akustycznej do bezpośredniego monitorowania uszkodzeń obiektów zabytkowych**

Ł. Bratasz, S. Jakiela, R. Kozłowski

Metody oparte na analizie fal dźwiękowych, powstających przy deformacji i uszkodzeniach zachodzących w strukturze ciał stałych i określanych jako emisja akustyczna (EA), są szeroko stosowane w nauce o materiałach i technice. Badania i prace wdrożeniowe nad zastosowaniem analizy EA do monitorowania uszkodzeń obiektów zabytkowych pod wpływem fluktuacji parametrów mikroklimatycznych prowadzono od 2003 roku. Zaowocowały one zbudowaniem prototypu czujnika EA, przetestowanego również w rzeczywistych warunkach obiektów zabytkowych, takich jak kościoły i muzea. W 2007 roku Instytut podpisał umowę licencyjną z firmą Hanwell Instruments Ltd z Wielkiej Brytanii będącą światowym liderem produkującym sprzęt do monitorowania warunków przechowywania obiektów zabytkowych, o produkcji i międzynarodowym marketingu tego czujnika.

### **Określenie kinetyki tworzenia oraz struktury monowarstw cząstek koloidalnych oddziaływających potencjałem krótkozasięgowym.**

Z. Adamczyk, A. Bratek, A. Michna, J. Barbasz

Oddziaływania cząstek koloidalnych i biokoloidalnych z powierzchniami granicznymi prowadzące do zjawisk adsorpcji, osadzania i adhezji mają istotne znaczenie, gdyż umożliwia optymalizację nowych technologii związanych z selektywną separacją cząsteczek DNA, protein, wirusów, komórek patologicznych, bakterii itp. Efektywność tych procesów jest często zwiększana przez użycie substancji wiążących, spełniających rolę centrów aktywnych. Głównym celem przeprowadzonych badań było wyznaczenie kinetyki tworzenia oraz struktury monowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych, wytwarzanych przez preadsorpcję polielektrolitów anionowych. Pomiar przeprowadzono dla monodispersyjnego lateksu polistyrenowego (o rozmiarze cząstek 660 nm), adsorbowanego na mice modyfikowanej warstwą polietyleno iminy (PEI), w warunkach transportu

konwekcyjnego i dyfuzyjnego, w zależności od stopnia pokrycia. Określono stałe szybkości adsorpcji cząstek koloidalnych, strukturę ich monowarstw oraz pokrycia maksymalne. Uzyskane wyniki interpretowano w oparciu o nowy model teoretyczny, uwzględniający fluktuacje gęstości ładunku elektrycznego, uzyskując ilościową zgodność. Wykazano, że dotychczas stosowana teoria DLVO, zakładająca równomierny rozkład ładunku jest nieadekwatna. Wyniki te pozwoliły również na opracowanie bardzo precyzyjnej metody wyznaczania stężenia polielektrolitów oraz biopolimerów w roztworach wodnych.

### **Ilościowy opis adsorpcji surfaktantów kationowych typu gemini na swobodnej powierzchni roztworów**

G. Para, M. Noworyta, P. Warszyński

Po raz pierwszy w literaturze przedmiotu dokonano ilościowego opisu adsorpcji surfaktantów kationowych typu gemini na swobodnej powierzchni roztworów. Do opisu adsorpcji użyto, wprowadzonego przez autorów, teoretycznego modelu adsorpcji surfaktantów jonowych, zmodyfikowanego w celu uwzględnienia wielokrotnego ładunku części hydrofilowej surfaktantu. Badania eksperymentalne wykonywane we współpracy, w ramach Sieci Naukowej SURUZ, z Zakładem Technologii Organicznej, Wydziału Chemicznego Politechniki Wrocławskiej wykazały, że aktywności powierzchniowe dwu- i trójładunkowych surfaktantów typu gemini są bardzo podobne. Efekt ten można wytłumaczyć częściową neutralizacją ładunku grupy hydrofilowej surfaktantu w skutek utworzenia asocjacji (kompleksów) surfaktant-przeciwjon chlorkowy. Pomiar aktywności swobodnych jonów chlorkowych w roztworze surfaktantów przy pomocy jonoselektywnej elektrody potwierdziły hipotezę istnienia kompleksów a zaproponowany model ich tworzenia pozwolił na wyznaczenie relatywnych stężeń jonów surfaktantu, przeciwjonów chlorkowych i kompleksów. Poprzez zastosowanie tak wyznaczonych stężeń w uogólnionym modelu adsorpcji surfaktantów jonowych otrzymano teoretyczne izotermy adsorpcji dobrze opisujące wyniki eksperymentalne. Praca została przejęta do druku w czasopiśmie *Langmuir*.

## **INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2007:**

### **Prace organizacyjne**

W roku 2007 zorganizowano 5 konferencji i posiedzeń naukowych, Dzień Otwarty Instytutu oraz stoisko na Krakowskim Festiwalu Nauki (w załączeniu reprodukcje plakatów i okładek materiałów).

### **Działalność popularyzatorska**

#### **Dzień Otwarty Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie 16 października 2007**

Główną ideą zorganizowania w dniu 16 października 2007, corocznego, szóstego z kolei Dnia Otwartego Instytutu było przekonanie, że upowszechnianie wśród społeczeństwa informacji o badaniach prowadzonych w laboratoriach naukowych jest niezbędnym warunkiem budowania aprobaty społecznej dla inwestycji dokonywanych w sferze nauki, zarówno przez instytucje państwowe, jak i prywatne.

W imprezie wzięło udział około 800 osób. Odwiedzający mieli okazję wysłuchać następujące wykłady, z których każdy powtarzany był dwukrotnie:

- A. Bielańskiego "Woda - związek bardzo pospolity"



- J. Habera "Energia - warunek rozwoju ludzkości"
- K. Małysy "Flotacja i tańczące pęcherzyki"
- D. Rutkowskiej-Żbik "Jak teoretyk widzi katalizator?"
- J. Szaleniec i M. Szaleńca "Zobaczyć niewidzialne. Chemia i fizyka w medycznej diagnostyce obrazowej"

W laboratoriach prezentowane były doświadczenia pokazujące zakres tematyki badawczej Instytutu:

- Czym można zastąpić krew, czyli rozpuszczalniki fluorowe w katalizie homogenicznej
- Chemia komputerowa, czyli jak obliczenia wzbogacają wiedzę na temat procesów katalitycznych
- Adsorpcja i jej zastosowania
- Czy czarne może być kolorowe?
- Powierzchnia, cienkie warstwy i nanostruktury
- Badania produktów wybuchu wulkanu metodą dyfrakcji rentgenowskiej
- Minerale, kryształy, kształty i pole magnetyczne
- Minerale w ochronie zdrowia i środowiska naturalnego
- Liofilizacja, czyli sposób na dobry katalizator, kawę rozpuszczalną i jedzenie dla aktywnych
- Molekularne lego
- Co to są nanokapsułki?
- Po co badać procesy osadzania?
- Zwilżalność – które powierzchnie lubią wodę?
- Co warto wiedzieć o materiałach zbudowanych z węgla
- Jak kataliza pomaga chronić środowiska?
- Cement rzymski – odkryty na nowo
- Nauka w "praniu" – współdziałanie wody i surfaktantów
- Magiczne rurki o strukturze plastra miodu
- Temperatura, ciśnienie i my
- Ciekawe doświadczenia chemiczne, cz. I i II

### **Audycje radiowe i telewizyjne**

1. M. Witko "Tańczące ciepło" – audycja radiowa "W kręgu nauki" w Polskim Radio Kraków, 20 lutego 2007.
2. A. Drelinkiewicz "Od biomasy do biodiesla – audycja w ogólnopolskim radio akademickim Flash 19 maja 2007
3. Ł. Bratasz, reportaż telewizyjny o badaniach w ramach projektu UE Sensorgan organów w farze w Olskuszu - stałym programie Futuris w TV EuroNews 13-19 października 2007

### **Wykłady popularno-naukowe**

1. J. Barbasz "Chemia wody", Krakowskie Stowarzyszenie Akwarystów, Instytut Botaniki UJ, Kraków 2007
2. J. Barbasz "Morskie inaczej", Krakowskie Stowarzyszenie Akwarystów, Galeria Przyrody, Kraków 2007
3. A. Bielański, "Wegiel - pierwiastek o stu twarzach", 8 Festiwal Nauki, Kraków 2007
4. Drelinkiewicz "Biomasa, biodiesel, biochemikalia", 8 Festiwal Nauki, Kraków 2007

**Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych** (załączono odpowiednie materiały)

1. 39. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 14-16 marca 2007. (B. Sulikowski)
2. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 19-21 marca 2007 (Z. Adamczyk)
3. ACENET Integrated Course on Applied Catalysis, Kraków, 26-30 marca 2007 (E. Serwicka-Bahranowska)
4. IDECAT Workshop "From Idea to Results - Effective Research Project Management", Kraków, 14-15 czerwca 2007 (M. Witko)
5. Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 16 października 2007 (M. Derewiński)
6. Workshop "New Colloidal Systems for Nano and Biotechnology", Kraków, 15-16 listopada 2007 (B. Jachimska)



## **DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU**



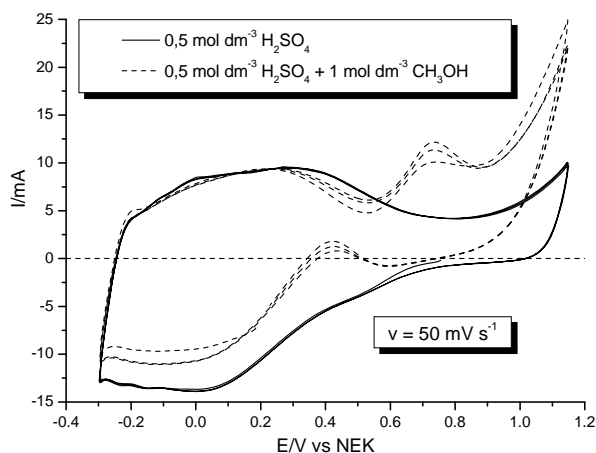
# **1. Nanotechnologia jako podstawa nowych materiałów katalitycznych**



# 1. 1. Nanostrukturalne materiały węglowe o strukturze grafitu jako nośniki metali przejściowych w elektrokatalizie. Preparatyka nanoszenia katalizatora i testowanie jego właściwości katalitycznych

(doc. Paweł Nowak, Dr inż. Aleksandra Pacuła)

Przedmiotem badań była charakterystyka nowego rodzaju nanostrukturalnych materiałów węglowych o strukturze grafitu pod kątem możliwości ich zastosowania jako nośników katalizatorów, w szczególności w ogniwach paliwowych. Materiały te syntezowane były na drodze wysokotemperaturowego rozkładu lotnych związków organicznych na powierzchni matrycy  $\text{SiO}_2$ , która była następnie usuwana przez rozpuszczenie w roztworze HF. Otrzymane materiały charakteryzowały się bardzo wysoką powierzchnią właściwą (powyżej  $1000 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ , w zależności od warunków syntezy) oraz obecnością mikro- i mezoporów. Na ich powierzchnię nanoszono platynę dwoma metodami: poprzez katodową redukcję roztworów kwasu heksachloroplatynowego na powierzchni elektrody z węgla szklanego, na którą uprzednio naniesiono materiał węglowy, lub poprzez adsorpcję na powierzchni materiału węglowego nanokryształów platyny wytworzonych w roztworze na drodze redukcji chemicznej (materiał ten nanoszono później na powierzchnię elektrody z węgla szklanego). Badano aktywność tak otrzymanych katalizatorów w reakcjach redukcji ditlenu rozpuszczonego w roztworze oraz w reakcji utlenienia metanolu. Badane materiały otrzymywane były przez rozkład związków zawierających azot (acetonitryl) i zawierały w związku z tym w swej strukturze azot. Jak wynika z doniesień literaturowych żelazo może tworzyć na powierzchni materiałów węglowych kompleksy z azotem, aktywne katalitycznie w reakcji redukcji ditlenu. Podjęto więc również próby otrzymania katalizatorów tej reakcji poprzez impregnację badanych materiałów węglowych roztworami soli żelaza. Aktywność otrzymanych katalizatorów badano metodą woltamperometrii cyklicznej. Ze względu na bardzo wysoką wartość powierzchni właściwej badanych materiałów, w przebiegach woltamperometrycznych obserwowano bardzo wysokie prądy ładowania podwójnej warstwy elektrycznej, co utrudniało interpretację wyników. Pojemność podwójnej warstwy elektrycznej oceniona z danych woltamperometrycznych i odniesiona do powierzchni właściwej wyznaczonej metodą BET była w przybliżeniu stała i wynosiła około  $10 \mu\text{F cm}^{-2}$ . Jak stwierdzono aktywny jest przede wszystkim katalizator obecny na zewnętrznej powierzchni materiału, katalizator obecny wewnątrz porów praktycznie rzecz biorąc nie bierze udziału w reakcjach. Niektóre z katalizatorów otrzymanych przez impregnację materiału węglowego solami żelaza wykazywały wysoką aktywność w reakcji redukcji ditlenu, porównywalną z wynikami publikowanymi w literaturze. Katalizator platynowy otrzymany przez katodową redukcję kwasu heksachloroplatynowego na materiale węglowym wykazał wysoką aktywność w reakcji utlenienia metanolu (patrz rysunek poniżej).



Rys.1. Utlenienie metanolu na elektrodzie z węgla szklanego pokrytej katalizatorem otrzymanym przez katodową redukcję  $\text{H}_2\text{PtCl}_6$  na powierzchni nanostrukturalnego materiału węglowego (pokazano trzy pierwsze cykle woltamperometryczne). Zawartość platyny w katalizatorze 30%. Powierzchnia elektrody  $0,8 \text{ cm}^2$ , ilość katalizatora  $0,5 \text{ mg}$ . Materiał mikroporowaty o powierzchni właściwej  $1720 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ .



## **1.2. Monodispersyjne, koloidalne zawiesiny nanokryształów zeolitów i ich wykorzystanie jako precursory w preparatyce nowych układów dla procesów katalitycznych i rozdzału**

*(doc.dr hab. Mirosław Derewinski, mgr Anita Burkat-Dulak, mgr Adam Węgrzynowicz)*

Szybki rozwój nanotechnologii spowodował w ostatnich latach zintensyfikowanie prac badawczych poświęconych m.in. preparatyce mikroporowatych nanomateriałów. Nowe sensory, ultracienkie filmy zeolitowe o niskiej stałej dielektrycznej, które są jednymi z najbardziej obiecujących materiałów do produkcji nowej generacji mikroprocesorów czy wreszcie opracowanie nowoczesnych detektorów dla potrzeb diagnostyki medycznej to przykłady najnowszych, potencjalnych zastosowań nanozeolitów. Równocześnie nanokryształy zeolitów oraz układy protozeolityczne są szeroko wykorzystywane jako prekursorsy cienkich filmów i warstw zeolitowych oraz w preparatyce układów o hierarchicznej strukturze porowatej. Monodispersyjne zawiesiny nanokryształów otrzymywane są najczęściej z homogennych, tzw. przezroczystych roztworów zawierających jedynie subkoloidalne cząstki amorficzne, w warunkach sprzyjających nukleacji, a nie wzrostowi kryształów.

Celem badań prowadzonych w okresie sprawozdawczym było opracowanie preparatyki oraz otrzymanie stabilnych zawiesin zawierających izolowane nanokryształy zeolitów typu MFI i BEA, a w dalszym etapie ich wykorzystanie w preparatyce membran zeolitowych oraz nowych materiałów o multimodalnej (mikro-/mezo-/makro) strukturze porowatej.

Stosując syntezę z przezroczystych roztworów, opracowano procedurę preparatyki monodispersyjnych zawiesin koloidalnych nanocząstek zeolitu MFI. Otrzymano zawiesiny, w których ponad 90% nanokryształów ma rozmiary w zakresie od 50 do 150 nm, a dominującą frakcję stanowią nanocząstki o wielkości ~100 nm. Niska temperatura syntezy (poniżej 90°C), wysokie stężenie organicznego szablonu strukturotwórczego (wodorotlenek tetrapropyloamoniowy), oraz stosowanie źródła krzemu o niskim stopniu polimeryzacji (tetraetoksyilan) są podstawowymi czynnikami sprzyjającymi tworzeniu jednorodnych zawiesin. Otrzymano również koloidalne, monodyspersyjne zawiesiny zeolitu typu BEA charakteryzujące się wąskim przedziałem rozkładu wielkości nanocząstek. Wyższa temperatura syntezy (120°C) raz dłuższy czas są konieczne do otrzymania zawiesin nanoBEA. Wielkość otrzymanych nanokryształów waha się w przedziale 170-180 nm. Badania XRD potwierdziły, że zeolit typu BEA jest jedynym mikroporowatym produktem syntezy. Określono stabilność otrzymanych zawiesin poprzez pomiar wartości potencjału zeta mierzonego dla stałego stężenia nanocząstek w zawieszynie. Określono wartości pH zawiesin, przy których nie następuje aglomeracja nanocząstek w większe układy, co ma szczególne znaczenie ze względu na przewidywane wykorzystanie otrzymanych zawiesin koloidalnych.

Otrzymane zawiesiny nanozeolitu MFI zostały wykorzystane jako zarodki w syntezie cienkich filmów zeolitowych na powierzchni stałych, porowatych nośników tlenkowych. Nanocząstki BEA zastosowano m.in., w preparatyce uporządkowanych struktur mikro-/makroporowatych na drodze samoorganizacji z mieszanin nanokryształów oraz większych (600-1000 nm) cząstek anionowych lateksów polistyrenowych.

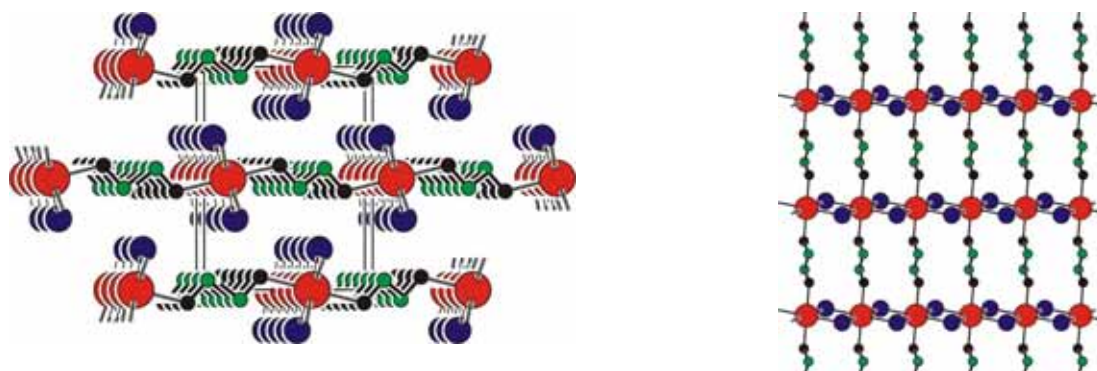
### 1.3. Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały warstwowe - synteza i badania strukturalne

(prof. Wiesław Łasocho, dr Maciej Grzywa, mgr Bartłomiej Gawel [Wydział Chemii UJ])

Przeprowadzono szereg testów nad uzyskaniem nowych hybrydowych połączeń warstwowych w których półprzewodnikowe monowarstwy Me(II)-X(VI) są rozdzielone warstwą diamin. Związki tego typu są interesującymi materiałami dla mikroelektroniki oraz optyki.

Przeprowadzone testy wskazują na możliwość uzyskania nowych połączeń warstwowych przy użyciu aromatycznych diamin. Dla jednego z uzyskanych połączeń ZnSe(m-ksylenediamina)<sub>1/2</sub>, przeprowadzono badania metodami XRD termicznego rozkładu w: atmosferze He, oleju parafinowym, mieszaninie acetonitrylu i CH<sub>3</sub>COOH. Ze wzrostem temperatury obserwowano rozkład związku z utratą części organicznej i tworzenie się ZnSe o wymiarach nanometrycznych.

W ramach badań preparatywnych uzyskano szereg nowych związków typu polimerów koordynacyjnych o wzorze ogólnym {-MeX<sub>2</sub>-NRN-}<sub>n</sub>.



Uzyskane nowe polimery koordynacyjne

(czerwone i niebieskie kulki przedstawiają to atomy metalu i chlorowca, czarne i zielone to atomy azotu i węgla)

W drugiej grupie badań prowadzono testy nad uzyskaniem szeregu połączeń warstwowych typu pięcio- i siedmiomolibdenianów amin. Związki tego typu zbudowane są z warstw molibdenowo-tlenowych rozdzielonych przez kationy organiczne. Badano warunki syntezy (pH i temperatura) oraz wpływ wielkości kationu organicznego na typ uzyskiwanego połączenia. W ramach badań uzyskano min. Nowy, warstwowy pięciomolibdenian p-bromoaniliny o parametrach sieciowych (30.790(5), 5.6425(9) 14.252(3) Å, 106.88(1)°, V=2369.5(5)Å<sup>3</sup>, SG; C2/c) oraz kilka nowych połączeń molibdenu z kationami organicznymi: oktamolibdenian 2,6-dimetyloaniliny, oktamolibdenian 1-naftalenoaminy, oktamolibdenian 2-naftalenoaminy.

Dla nowych połączeń prowadzono badania fizykochemiczne (spektroskopowe, DSC, badania procesów rozkładu termicznego) oraz strukturalne. Ponieważ w obu grupach badań dominowały materiały polikrystaliczne, były to badania metodami dyfraktometrii proszkowej.

## **1.4. Tlenkowe i metaliczne nanostruktury na powierzchni: wytwarzanie, struktura i dynamika, właściwości elektronowe, reaktywność**

*(prof. Józef Korecki, dr Nika Spiridis, dr Jacek Gurgul, dr Robert Socha, dr inż. Dorota Wilgocka-Ślęzak, mgr Kinga Freindl, mgr Ewa Zackiewicz)*

### **1. Adsorpcja tlenu na powierzchni Fe(110)**

Badania adsorpcji tlenu na żelazie są niezwykle istotne ze względu na znaczenie tego zjawiska dla procesów takich jak utlenianie, pasywacja, korozja, a ostatnio także ze względu na zastosowania spintroniczne układów metal-izolator. Nasze zainteresowanie powierzchniowym utlenianiem Fe wynika z programu dotyczącego warstw podwójnych metal-tlenek, w którym epitaksjalne tlenki żelaza stosowane były jako modelowe układy do badań dynamiki w nano-skali z użyciem jądrowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego. Pomimo znacznej ilości prac dotyczących początkowych faz utleniania Fe(110), informacje o strukturze adsorbentu w funkcji pokrycia tlenem są niekompletne i często ze sobą sprzeczne. Zastosowanie przez nas epitaksjalnych warstw Fe nanoszonych na monokryształ W(110) pozwoliło na uzyskanie powierzchni Fe(110) o wysokiej czystości i doskonałej jakości strukturalnej, umożliwiającą wysokorozdzielczą analizę strukturalną z zastosowaniem dyfrakcji elektronów niskoenergetycznych (LEED). Adsorpcja tlenu badana była przy temperaturze pokojowej, w szerokim zakresie ekspozycji (od 0.5 do 500 L). Potwierdziliśmy istnienie struktury (2x2) adsorbentu dla niskich ekspozycji z zakresu 0.5-5 L. Dla dalszych stadiów adsorpcji (5-80 L), strukturę opisywaną w literaturze jako (3x1), zidentyfikowaliśmy jako znacznie bardziej skomplikowaną strukturę o skośnej komórce elementarnej, zawierającej prawdopodobnie trzy (pokrycie 0.375) atomy tlenu. Zaproponowaliśmy kilka modeli strukturalnych, których weryfikacja wymagać będzie wysokorozdzielczych pomiarów STM lub/i ilościowej analizy LEED typu I-V. Ponadto dla pokrycia bliskiego jeden zaobserwowaliśmy wyraźną uporządkowaną strukturę (3x2), o której do tej pory nie było doniesienia w literaturze, a która stanowić może istotną fazę adsorpcji poprzedzającą formowanie się tlenku rozumianego jako wnikanie tlenu pod powierzchnię. Pomiar spektroskopowe z użyciem rezonansowego jądrowego rozpraszania promieniowania synchrotronowego dostarczyły informacji o zmianie struktury elektronowej powierzchniowej warstwy Fe w kolejnych stadiach adsorpcji.

### **2. Nanostruktury i reaktywność na wicynalnych powierzchniach metali**

Ultracienkie warstwy i nanostruktury metali na powierzchniach wicynalnych są przedmiotem intensywnych badań ze względu na szczególne właściwości katalityczne i magnetyczne. Badane były nanostruktury metali (Fe, Au) na wicynalnych powierzchniach tlenkowych i metalicznych. Porównano wzrost Fe na płaskiej powierzchni W(110) i na wicynalnej do niej powierzchni W(540). Celem badań było określenie wpływu regularnych stopni podłoża wicynalnego typu W(540) na strukturę i morfologię warstwy adsorbentu Fe. Stosując techniki STM i LEED szczególną uwagę zwrócono na morfologię wysp Fe otrzymywanych w wysokich temperaturach. Badania strukturalne były punktem wyjścia do analizy właściwości magnetycznych z użyciem magneto-optycznego efektu Kerr'a i rezonansowego, jądrowego rozpraszania promieniowania X. Drugim badanym systemem, ważnym z punktu widzenia katalizy, są nanostruktury Au na powierzchni tlenku żelaza otrzymywanej przez wzrost ultracienkiej warstwy na Pt(997). Przy pomocy STM badana była samoorganizacja nanocząstek Au, wynikająca zarówno z modulacji atomowej struktury FeO, jak i morfologii wicynalnej powierzchni tlenku. Stosując technikę TPD badano też ko-adsorpcję CO i O<sub>2</sub> na powierzchni Pt(997).

## 1.5. Badanie właściwości fizykochemicznych i katalitycznych układów pallad-żywice mikro i makroporowate

(doc. Alicja Drelinkiewicz, dr Anna Waksmundzka-Góra, mgr Anna Knapik)

Zastosowanie żywic polimerowych jako nośników dla katalizatorów metalicznych podyktowane jest faktem ich specyficznych właściwości, które bardzo istotnie mogą warunkować przebieg reakcji katalitycznej. Można oczekiwać, że obecność grup funkcyjnych w strukturze polimerów (grupy estrowe, karbonylowe, karboksylowe, aminowe) będzie wpływać na centra aktywne w zdyspergowanych cząstkach metalu (Palladu w obecnych badaniach). Właściwości hydrofobowe żywic i zdolność ich pęcznienia w środowisku reakcji katalitycznej (uwodornianie w fazie ciekłej w obecnych badaniach) może warunkować dostępność reagentów do centrów aktywnych jak i selektywność reakcji. Efekty te badane były w obecnej pracy.

W obecnej pracy reakcje uwodorniania prowadzono dla szeregu nienasyconych kwasów karboksylowych ( $\alpha$ -metyl-akrylowy, krotonowy,  $\beta$ -metyl-krotonowy, cynamonowy,  $\alpha$ -metyl-cynamonowy, maleinowy, fumarowy), pochodnych kwasu akrylowego, które różniły się rodzajem, liczbą i położeniem podstawników ( $\text{CH}_3$ ,  $\text{C}_6\text{H}_5$ ,  $\text{COOH}$ ) przy atomach węgla wiązania  $\text{C}=\text{C}$ . W badaniach stosowano katalizatory palladowe (0.25-4 wt % Pd) zawierające nośnik polimerowy. Były to makroporowate żywice OFP o stopniu usieciowania 3%, 10 % i 20 % w formie sferycznych ziaren (150-250  $\mu\text{m}$ ), na osnowie metakrylanu 2-hydroksylu zawierająca grupy karboksylowe i estrowe (styren 77% mol, metakrylan 2-hydroksyetylu 20 % mol, bezwodnik glutarowy – czynnik sieciujący 3-20 % mol). Syntezę katalizatorów prowadzono z roztworu  $\text{Pd}(\text{CH}_3\text{COO})_2$  w THF (rozpuszczalnik, który powodował największe pęcznienie ziaren żelu OFP). Katalizatory zredukowane były roztworem  $\text{NaBH}_4$  w mieszaninie THF- $\text{CH}_3\text{OH}$ . Metodą SEM stwierdzono równomierny rozkład palladu. Pd metaliczny był w postaci nano-cząstek 2-5 nm, (TEM, XRD), co potwierdza zdolność stosowanej żywicy do stabilizacji wysoko zdyspergowanego Pd.

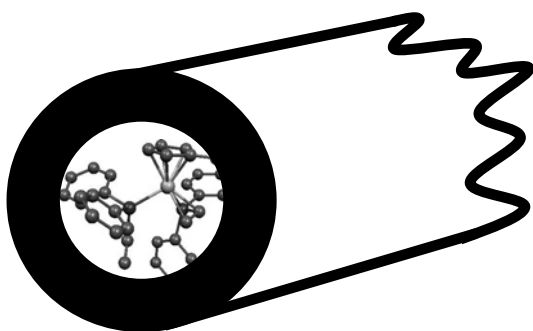
Testy uwodorniania prowadzono w rozpuszczalniku THF, gdy katalizatory były w stanie spęcznienia (temp. 22<sup>0</sup>C, atmosferyczne ciśnienie wodoru). Stwierdzono, że stopień pęcznienia polimeru, zależny od zawartości Pd jak i usieciowania polimeru wpływał na szybkość uwodorniania w obecności Pd/OFP. Dla porównania, testy katalityczne przeprowadzono również w obecności typowego katalizatora 4%Pd/SiO<sub>2</sub>. Wyniki testów katalitycznych (szybkość reakcji) wskazywały na zasadnicze różnice pomiędzy pracą katalizatorów Pd/żywice i Pd/SiO<sub>2</sub>. W celu poznania czynników, które warunkują aktywność katalizatorów w testowanych reakcjach przeprowadzono analizę wpływu właściwości reagentów. Dla poszczególnych reagentów obliczono wielkość cząsteczki (d), hydrofobowość (log P) i "absolute hardness". Analiza korelacji pomiędzy uzyskanymi doświadczalnie szybkościami reakcji uwodorniania i poszczególnymi „parametrami” dla cząsteczek reagentów pozwoliła na określenie różnic i podobieństw w pracy katalizatorów Pd/żywice i Pd/SiO<sub>2</sub>.

Dla typowego katalizatora Pd/SiO<sub>2</sub>, stwierdzono bardzo dobrą korelację szybkości uwodorniania z wielkością cząsteczek i właściwościami elektronowymi (hardness), nie obserwowano natomiast wpływu hydrofobowości reagentów. W przypadku Pd/żywice stwierdzono, że parametrami, które warunkują szybkość uwodorniania są wielkość cząsteczek i ich hydrofobowość, podczas gdy, efekt elektronowy nie jest istotny. Ponadto, obecność dwu grup COOH, lub CH<sub>3</sub> w cząsteczkach wykazywała dodatkowy wpływ na szybkość ich uwodorniania.

## 1.6. Materiały mezoporowate jako nanoreaktory katalityczne

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr Dorota Duraczyńska, dr inż. Małgorzata Zimowska, dr inż. Alicja Michalik-Zym, inż. Daria Napruszewska, Zofia Czula, dr Zbigniew Olejniczak [Instytut Fizyki Jądrowej PAN])

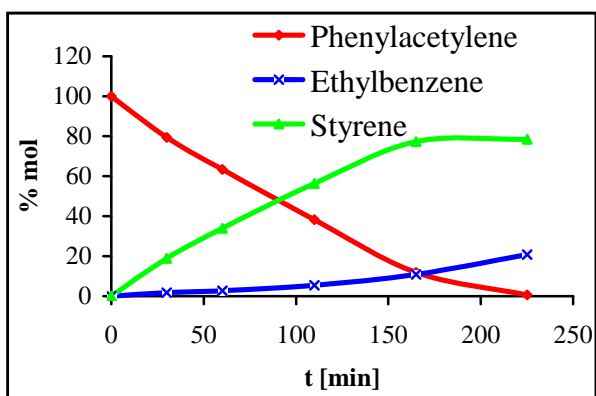
Mezoporowate krzemionki zawierające jednorodne, przestrzennie uporządkowane pory o średnicach powyżej 2 nm, stanowią atrakcyjną grupę nośników katalitycznych. Szczególne znaczenie ma zastosowanie tych materiałów jako nośników dla aktywnych katalitycznie substancji, w których znaczne rozmiary cząsteczek wykluczają osadzenie ich wewnątrz porów konwencjonalnych nośników mikroporowatych, takich jak zeolity, czy podpierane minerały ilaste. Wśród układów tego typu szczególne zainteresowanie budzą związki organometaliczne, znane z aktywności katalitycznej w reakcjach homogenicznych. Zachęcające rezultaty uzyskane przez nas przy opracowywaniu nowych katalizatorów dla procesów utleniania, z wykorzystaniem metaloporfiryn immobilizowanych na powierzchni różnego typu mezoporowatych krzemionek, skłoniły nas do podjęcia podobnych badań nad związkami organometalicznymi będącymi katalizatorami procesów uwodornienia..



Rys. 1. Model strukturalny (1) immobilizowanego na HMS(Si/Al=40)

Jako katalizator uwodornienia wybrano kationowy kompleks rutenu(II),  $[(\eta^5\text{-MeC}_5\text{H}_4)\text{Ru}(\eta^3\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)(\eta^1\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)]^+$ , oznaczony dalej (1). Zawiera on dwa różne ligandy fosfinowe, z których jeden,  $(\eta^3\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)$ , jest labilny, co polega na tym, że jedno z dwóch wiązań łączących go z metalem centralnym w warunkach reakcji katalitycznej pęka, umożliwiając koordynację cząsteczek substratu, podczas gdy druga grupa,  $(\eta^1\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)$ , pozostaje mocno związana z centrum rutenowym. Obecność ligandów tego typu może wywołać przekształcenie cząsteczki

substratu, które w innych warunkach nie miałyby miejsca. Kompleks (1) osadzono w porach heksagonalnej mezoporowatej krzemionki dotowanej glinem, HMS(Si/Al=40), stosując metodę wymiany jonowej (Rys.1). Katalizator scharakteryzowano przy pomocy XRD, TG/DTG, FTIR,  $^{31}\text{P}$  NMR,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{27}\text{Al}$  MAS NMR, UV-Vis, XPS, oraz adsorpcji azotu w 77 K. Uzyskano potwierdzenie, że kationy (1) wniknęły w system porów nośnika, zachowując wszystkie swoje podstawowe właściwości, a struktura nośnika nie uległa naruszeniu. Tak otrzymane katalizatory okazały się aktywne i selektywne w reakcji uwodorniania fenyloacetyleny (Rys.2). Aktywność naiesionego katalizatora stanowiła około 2/3 aktywności obserwowanej dla reakcji homogenicznej, przy zachowaniu równie wysokiej selektywności do styrenu (87% przy 90% konwersji fenyloacetyleny). Obniżenie aktywności jest najprawdopodobniej związane z ograniczonym dostępem substratu do części centrów rutenowych ulokowanych w porach nośnika. Naniesiony katalizator (1)/HMS(Si/Al=40) jest w warunkach reakcji stabilny i nie ulega wymywaniu, co sprawia, że możliwe jest jego powtórne użycie.



Rys. 2. Uwodornienie fenyloacetyleny w obecności 5.9 wt.% (1)/HMS(Si/Al=40).

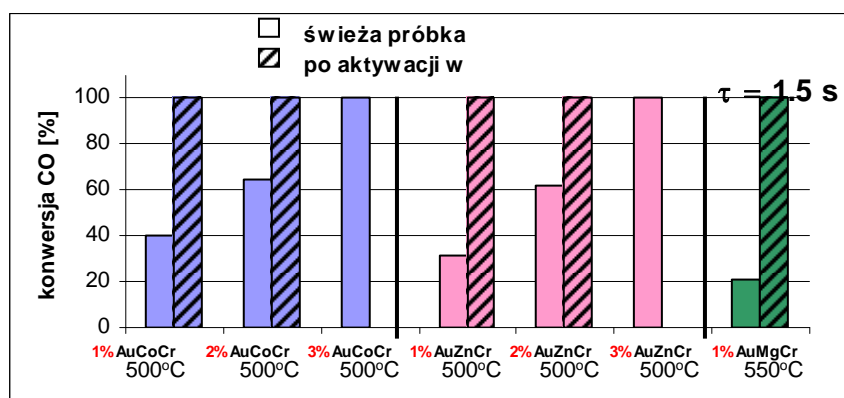
## **2. Procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju**



## 2.1. Optymalizacja warunków preparatyki nośników na osnwie spineli chromowych $M\text{Cr}_2\text{O}_4$ i składu katalizatorów $\text{Au}/M\text{Cr}_2\text{O}_4$ do reakcji utleniania związanych z ochroną środowiska.

(prof. Barbara Grzybowska-Świerkosz, dr Małgorzata Ruszel, Irena Gressel, dr Piotr Olszewski)

W badaniach ostatnich lat stwierdzono, że nanocząstki Au zdyspergowane na spinelach  $M^{\text{II}}\text{Cr}_2\text{O}_4$ ,  $M\text{Cr}$ , gdzie  $M^{\text{II}} = \text{Co}, \text{Fe}, \text{Mn}, \text{Mg}$  (nowe nośniki), są obiecującymi katalizatorami reakcji utleniania CO i tzw. priorytetowego lub selektywnego utleniania CO w obecności nadmiaru wodoru (PROX). W roku bieżącym podjęto badania nad optymalizacją warunków preparatyki nośników, oraz zawartości Au w układach. Zakres badań obejmował: a) syntezę metodą cytrynianową nośników CoCr, ZnCr oraz MgCr, prażenie ( $250\text{-}600^\circ\text{C}$ ), b) charakterystykę składu fazowego i powierzchni właściwej preparatów (XRD i BET), c) otrzymanie metodą strącania-osadzania katalizatorów nano-Au na nowej serii MCr ( $M = \text{Co}, \text{Zn}, \text{Mg}$ ) o różnej zawartości Au (1, 2, 3 % wag) i, dla AuCoCr, o różnej temperaturze prażenia nośnika ( $350$  i  $500^\circ\text{C}$ ), d) testy katalityczne w reakcji utleniania CO dla katalizatorów świeżych i po wstępnej aktywacji wodorem oraz reakcji PROX CO w temperaturach  $35$  i  $60^\circ\text{C}$ . Określono optymalne temperatury kalcynacji zapewniające: a) jednorodny skład fazowy, b) porównywalną powierzchnię właściwą odpowiednią dla osadzania nano-Au jako:  $500^\circ\text{C}$  dla CoCr i ZnCr oraz  $550^\circ\text{C}$  dla MgCr.



Rys. Wpływ zawartości Au na aktywność katalizatorów Au/MCr w reakcji utleniania CO

Na podstawie przeprowadzonych badań, stwierdzono, że zawartość Au, oraz temperatura prażenia nośnika wpływają na aktywność katalityczną układów AuMCr w reakcji utleniania CO.

Dla układów zawierających nośniki prażone w optymalnych temperaturach:

- 1) Konwersja CO w reakcjach CO i PROX CO zmienia się w szeregu:  $\text{Au}/\text{CoCr} \approx \text{AuZn} \gg \text{AuMg}$  i rośnie po aktywacji w  $\text{H}_2$ .
- 2) Dla układów serii AuCoCr i AuZnCr konwersja katalizatorów świeżych w reakcji utleniania CO rośnie, a dla reakcji PROX maleje, ze wzrostem zawartości Au od 1 - 3 % wag.
- 3) Po aktywacji wodorem wszystkie katalizatory wykazują w reakcji utleniania CO konwersję 100%, niezależnie od zawartości Au.
- 4) Selektywność do  $\text{CO}_2$  w reakcji PROX jest wysoka ( $> 90\%$ ) dla wszystkich badanych układów, maleje z temperaturą reakcji i ze wzrostem zawartości Au.

Należy także podkreślić, że wartości konwersji tych katalizatorów są wyższe w porównaniu z uprzednio badanymi katalizatorami, w których stosowano nośniki o wyższych temperaturach prażenia, a otrzymane dla reakcji PROX wyniki są porównywalne z najlepszymi opisywanymi w literaturze. Prowadzone są prace w grupie dr Tadeusza Macheja nad zastosowaniem tych katalizatorów w praktyce.



## 2.2. Utleniające odwodornienie (UOW) izobutanu na katalizatorach CrO<sub>x</sub>/nośnik tlenkowy (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub>): wpływ potasu na właściwości tlenu katalizatora i chemisorpcję tlenu molekularnego.

(prof. Barbara Grzybowska-Świerkosz, dr Katarzyna Samson, doc. Ryszard Grabowski, dr Antonina Kozłowska, doc. Jerzy Słoczyński)

Badania poprzednich lat wykazały przeciwny wpływ potasu na właściwości katalityczne układów CrO<sub>x</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (CrAl) i CrO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub> (CrTi) [stosunek K/Cr = 0.1 dla obu układów] w reakcji UOW izobutanu: wzrost selektywności do izobutenu dla układu CrTi i zmniejszenie dla układu CrAl. Różnice te nie mogą być wytłumaczone zmianami właściwości kwasowo-zasadowych (dla obu układów domieszka potasu powoduje zmniejszenie kwasowości oraz zwiększenie zasadowości).

W roku sprawozdawczym, w celu wytłumaczenia odmiennego efektu potasu dla tych układów przeprowadzono badania redukcji wodorem (H<sub>2</sub>-TPR) oraz chemisorpcji tlenu. Dodatkowo, dla sprawdzenia negatywnego efektu potasu (niespotykanego do tej pory w literaturze przedmiotu), otrzymano serię preparatów CrAl o różnej zawartości potasu (Cr/Al=0.05–0.4), scharakteryzowano ich skład powierzchniowy techniką XPS oraz wykonano dla nich testy katalityczne w reakcji UOW izobutanu. Potwierdzono negatywny wpływ potasu na selektywność do izobutenu w reakcji UOW izobutanu dla układu CrAl w całym zakresie badanych stężeń K (K/Cr=0.05-0.4). W tabeli 1 podano dane redukcji oraz chemisorpcji tlenu dla wybranych katalizatorów CrAl i CrTi. Domieszka potasu w obu przypadkach: a) zmniejsza redukowalność (przesuwa T<sub>max</sub> w stronę wyższych temperatur oraz zmniejsza szybkość redukcji) b) obniża energię aktywacji chemisorpcji tlenu, wykazuje natomiast odmienny wpływ na szybkość chemisorpcji tlenu oraz na pokrycie powierzchni tlenem w mieszaninie reduktor/utleniacz.

Tabela 1.

| katalizator       | $\Delta m_{ox}$<br>[ $\mu\text{mol O}$<br>$\text{m}^{-2}$ ] | %<br>ml | lnk <sub>o</sub> | $\alpha$<br>[kJ<br>$\text{mol}^{-1}$ ] | $E_{act,ox}$<br>[kJ<br>$\text{mol}^{-1}$ ] | $v_{ox} \times 10^4$<br>[ $\mu\text{mol O}$<br>$\text{m}^{-2}$<br>$\text{s}^{-1}\text{kPa}^{-1}$ ] | T <sub>max</sub> **<br>[°C] | $v_{red} \times 10^5$ ***<br>[ $\mu\text{mol O}$<br>$\text{s}^{-1}\text{m}^{-2}$<br>$\text{kPa}^{-1}$ ] | $v_{ox}/v_{red}$ |
|-------------------|---|---------|------------------|--|--|--|-----------------------------|---|------------------|
| CrAl              | 1.58  | 9.5     | 38.0             | 0.18                                   | 225.0                                      | 0.81   | 353                         | 7.0   | 0.12             |
| CrAlK<br>K/Cr0.1  | 1.55  | 9.3     | 19.4             | 0.21                                   | 133.0                                      | 1.78   | 383                         | 2.0   | 0.89             |
| CrAlK<br>K/Cr0.25 | 1.82  | 11.0    | 14.5             | 0.23                                   | 114.0                                      | -  | -                           | -   | -                |
| CrTi              | 0.98  | 5.9     | 2.9              | 0.59                                   | 44.0                                       | 147  | 335<br>435                  | 20.0  | 7.4              |
| CrTiK             | 0.73  | 4.4     | -2.4             | 0.61                                   | 32.0                                       | 1.08   | 360<br>480                  | 4.0   | 0.27             |

\* z chemisorpcji tlenu (w 300°C), \*\* T<sub>max</sub> z widma H<sub>2</sub>TPR, \*\*\* z pomiarów H<sub>2</sub>-TPR (do 300°C)

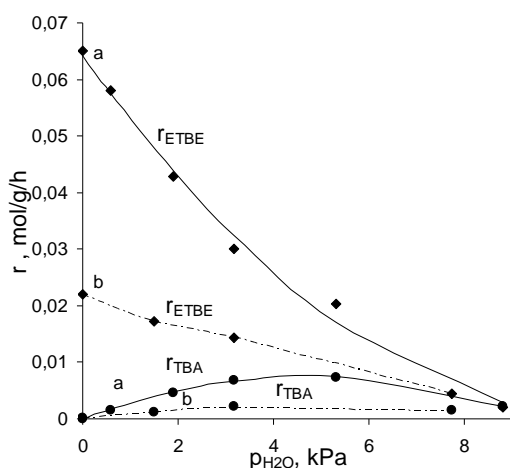
Odmienny wpływ potasu na selektywność do izobutenu w reakcji UOW izobutanu dla katalizatorów CrTi i CrAl wytłumaczono jego odmiennym działaniem na powyższe dwa parametry. Dla układu CrTi potas zmniejsza szybkość chemisorpcji tlenu i pokrycie powierzchni tlenem  $\theta$ , podczas gdy dla CrAl dodatek potasu zwiększa szybkość chemisorpcji i pokrycie tlenem; zwiększenie  $\theta$  powoduje obniżenie selektywności do olefiny, zmniejszenie  $\theta$ - wzrost selektywności.

### 2.3. Kinetyka syntezy eteru etylo-tert-butyłowego (ETBE) z etanolu i izobutenu w układzie uwodnionym

(prof. Adam Bielański, dr inż. Anna Micek-Ilnicka)

Eter etylo-tert-butyłowy (ETBE) jest obecnie używany jako jedyny dodatek przeciwstukowy do benzyn. ETBE, jako związek bardziej przyjazny dla środowiska, wyparł stosowany przez wiele lat eter metylo-tert-butyłowy (MTBE).

Celem badań było określenie wpływu wody obecnej w fazie gazowej na kinetykę syntezy eteru ETBE, otrzymywanego na drodze elektrofilowej addycji etanolu do izobutenu. Reakcję eteryfikacji i towarzyszącą jej w układzie uwodnionym reakcję syntezy tert-butyłowego alkoholu przeprowadzano przy użyciu heteropolikwasu typu Wellsa-Dawsona  $H_6P_2W_{18}O_{62}$  w temperaturze  $40^\circ C$ . Otrzymane, w oparciu o badania kinetyczne, w szerokim zakresie stężeń reagentów, równania szybkości tworzenia ETBE i TBA mają postać wykładniczą. Uzyskane rzędy reakcji syntezy ETBE w stosunku do etanolu (-2.0) i izobutenu (1.7) są niezależne od obecności wody w fazie gazowej. Zarówno etanol jak i woda wpływają inhibitująco na szybkość tworzenia ETBE ( $r_{ETBE}$  - rysunek).



Rys. Szybkość reakcji syntezy ETBE i TBA w zależności od ciśnienia wody ( $p_{etanolu}=17.2$  kPa, przy  $p_{izobutenu}$  18.4 kPa (a) i 10.3 kPa (b).

Z kolei zależność szybkości tworzenia TBA ( $r_{TBA}$ ) od ciśnienia wody jest funkcją niemonotoniczną (rysunek). Wyróżniono „katalizujący zakres” ciśnień wody do ok. 4 kPa (krzywa a) i „inhibitujący zakres” od 4 kPa.

W oparciu o wyniki pomiarów kinetycznych zaproponowano mechanizm reakcji, zgodnie, z którym polarny etanol i woda wnikają do wnętrza krystalitów heteropolikwasu, natomiast niepolarny izobuten pozostaje na powierzchni katalizatora tworząc oligomery. Zarówno etanol jak i izobuten wiążą protony z katalizatora, tworząc jony etoksoniowe w objętości heteropolikwasu jak i zoligomeryzowane karbokationy na jego powierzchni. Reakcja syntezy ETBE zachodzi na powierzchni heteropolikwasu pomiędzy karbokationem a obojętnym etanolem. Reakcja syntezy TBA jest również reakcją powierzchniową pomiędzy karbokationem, a wodą pochodzącą z objętości katalizatora. Jeśli ciśnienie wody odpowiada „katalizującemu zakresowi” woda działa jako substrat, wchodząc głównie w reakcje z utworzeniem TBA, nie blokując protonów. Natomiast w „inhibitującym zakresie” ciśnienia wody wiąże ona protony tworząc klastery  $(H_2O)_mH^+$ , co powoduje spadek stężenia karbokationów. W oparciu o założony mechanizm reakcji otrzymywania ETBE i TBA sformułowano matematyczny model przebiegu tych procesów.

## 2.4. Rozpoznawcze badania wytwarzania biopaliwa w procesie transestryfikacji; wstępny dobór katalizatorów

*(doc. Alicja Drelinkiewicz, dr Tomasz Kasza, mgr Adam Zięba, prof. Adam Bielański)*

Zbudowano i wypróbowano mikroreaktor pozwalający na prowadzenie procesu transestryfikacji w temperaturze do 60<sup>0</sup>C przy ciśnieniu atmosferycznym. Opracowano i wdrożono zestaw procedur analitycznych (GC, HPLC) pozwalający na oznaczenie zawartości wytworzonych estrów metylowych (bio-estry) oraz konwersji oleju roślinnego.

Reakcje transestryfikacji metanolem prowadzono dla oleju rycynowego zarówno w warunkach katalizy homogenicznej jak i heterogenicznej. W warunkach homogenicznych zastosowano typowe katalizatory zasadowe (KOH) w celu skontrolowania sprawności układu katalitycznego.

Jako katalizatory heterogeniczne użyto w pierwszym etapie sprawdzonych w technice katalizatorów zasadowych Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/KOH, które syntezowano metodą impregnacji  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> roztworem KOH w wodzie i etanolu. Dalsze badania prowadzono dla katalizatorów kwasowych, biorąc pod uwagę, fakt, że ten typ katalizatorów jest szczególnie obiecujący, ze względu na możliwość użycia katalizatorów kwasowych w reakcji prowadzonej przy wykorzystaniu odpadowych olejów roślinnych użytych w procesach gastronomicznych (zawierają wolne kwasy tłuszczowe). Zastosowano dwie serie katalizatorów stałych, które jako nośnik zawierały ZrO<sub>2</sub> otrzymany metodą standardową oraz metodą zol-żel. Katalizatory pierwszej serii zawierały żel ZrO<sub>2</sub> impregnowany H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (próbki suszone i prażone w zmiennych warunkach), druga seria to katalizatory zawierające żel ZrO<sub>2</sub> impregnowany roztworem heteropolikwasu H<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> (HPA) a także katalizatory otrzymane przez współstrącanie żelu ZrO<sub>2</sub> i HPA. Katalizatory te zawierały różną ilość HPA w zakresie od 9 wt % do 40 wt % HPA w ZrO<sub>2</sub>. Wszystkie katalizatory kwasowe okazały się aktywne w transestryfikacji oleju rycynowego. Były one ponadto badane metodami mikroskopii skaningowej i spektroskopii w podczerwieni.

W toku badań okazało się, że podstawowym problemem jest rozstrzygnięcie czy czynnik aktywny katalitycznie pozostaje na stałym nośniku czy też częściowo przechodzi do roztworu reakcyjnego i działa jako katalizator homogeniczny.

Problem związania czynnika kwasowego z powierzchnią nośnika musi być przedmiotem dalszych badań. Stwierdzono że, ilość HPA w katalizatorze wyraźnie wpływa na tak pojętą zmywalność kwasu, który łatwo rozpuszcza się w metanolu. Tego typu katalizatory stosowane przez innych badaczy w reakcjach estryfikacji kwasów alifatycznych wyższymi alkoholami (butanol) wykazywały stabilną aktywność a HPA nie ulegał wymywaniu.

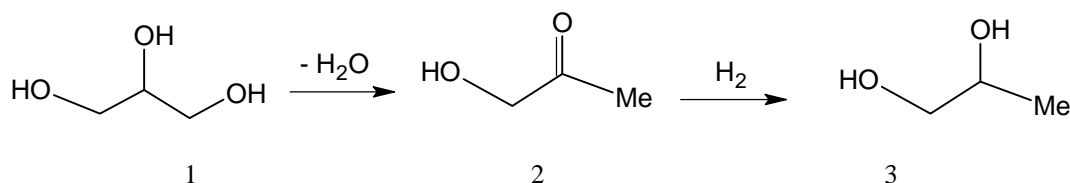
Ważną obserwacją było stwierdzenie, że kolejność kontaktowania katalizatora z reagentami (olej lub metanol) ma istotny wpływ na przebieg reakcji katalitycznej. Katalizator skontaktowany najpierw z olejem traci znaczącą część swojej aktywności. O takim efekcie nie donosiły dotąd znane nam publikacje. Bliższe rozpoznanie tego zjawiska wymaga badań emulsji wytwarzającej się w czasie mieszania komponentów reakcji: oleju i alkoholu.

## 2.5. Katalityczne transformacje gliceryny dla jej utylizacji jako produktu ubocznego przy produkcji biopaliw

(prof. Jerzy Haber, dr Katarzyna Pamin, dr Jan Połtowicz)

Produkcja olejów napędowych z olejów roślinnych jako źródła surowca staje się w wielu krajach coraz bardziej popularna. Takie oleje, choć droższe w produkcji, charakteryzują się mniejszą emisją szkodliwych zanieczyszczeń. Tak zwany "biodiesel" składa się z estrów metyloowych kwasów tłuszczowych (FAME), otrzymywanych w wyniku transestryfikacji trójglicerydów obecnych w naturalnych olejach roślinnych. Reakcja transestryfikacji zachodzi pomiędzy trójglicerydami a metanolem w obecności katalizatora o właściwościach zasadowych. Głównym produktem reakcji są estry metylole kwasów tłuszczowych, a gliceryna jest produktem ubocznym. Jednakże ze wzrostem popularności "biodiesla" należy liczyć się z nadprodukcją gliceryny, którą trzeba będzie zagospodarować.

Gliceryna,  $C_3H_8O_3$ , jest alifatycznym nasyconym alkoholem trójwodorotlenowym, której głównym odbiorcą pozostaje nadal przemysł kosmetyczny i spożywczy. Jednym z pomysłów na przerób wzrastających ilości gliceryny jest jej konwersja do glikolu propylenowego (Rys.1).



Rys. 1. Konwersja gliceryny do glikolu propylenowego

W pierwszym etapie gliceryna (1) zostaje odwodniona do hydroksyacetonu (2), który następnie ulega hydrogenolizie do glikolu propylenowego (3). Obie reakcje zachodzą przy podwyższonym ciśnieniu i temperaturze w obecności katalizatora Cu-Cr.

Pierwszy etap naszych badań polegał na syntezie wybranych katalizatorów. Jako katalizatory wybrano cezowe sole kwasu fosfowolframowego, które otrzymano przez reakcję stechiometrycznych ilości  $Cs_2CO_3$  z odpowiednią ilością heteropolikwasu. Sole cezowe kwasu fosfowolframowego są znane jako katalizatory o mocnych właściwościach kwasowych. Otrzymane preparaty zostały scharakteryzowane za pomocą analizy termicznej, rentgenograficznej, spektroskopii FTIR i UV-Vis.

Otrzymany glikol propylenowy znajduje zastosowanie jako preparat zapobiegający zamarzaniu, stosowany głównie w motoryzacji oraz preparat służący do usuwania lodu z powierzchni samolotów.

## 2.6. Synteza i badanie właściwości elektrochemicznych heteropolikwasów - katalizatorów procesów utleniania węglowodorów

(prof. Jerzy Haber, dr Katarzyna Pamin)

Heteropolikwasy o strukturze Keggina są szeroko stosowane jako katalizatory w reakcjach kwasowo – zasadowych i reakcjach utleniania. Ich strukturę można łatwo modyfikować poprzez zmianę składników wchodzących w skład cząsteczki, takich jak typ atomu addenda, heteroatomu czy też jonu zobojętniającego. Heteropolizwiązki modyfikowane metalami przejściowymi są interesujące z naukowego i praktycznego punktu widzenia. Wprowadzenie kationu metalu posiadającego różne stopnie utleniania pozwala na otrzymanie katalizatorów z przeniesieniem ładunku.

Pierwszy etap pracy związany jest z wprowadzaniem kationów metali przejściowych w pozycje kationowe struktur heteropolikwasów. Do kwasów  $H_3PW_{12}O_{40}$  i  $H_3PMo_{12}O_{40}$  wprowadzone zostały kationy kobaltu. W wyniku syntezy otrzymane zostały dwie serie soli kobaltowych  $H_2Co_{0.5}PM_{12}O_{40}$ ,  $HCoPM_{12}O_{40}$  i  $Co_3(PM_{12}O_{40})_2$ , gdzie  $M=Mo, W$ . Właściwości redoksove katalizatorów zostały scharakteryzowane za pomocą cyklicznej woltamperometrii oraz w reakcji utleniania cyklooktanu tlenem molekularnym. Reakcja utleniania była prowadzona w temperaturze  $120^\circ C$  przez 6 godzin pod ciśnieniem 10 atm.. Produktami tej reakcji był cyklooktanol i cyklooktanon. Wprowadzenie kationów w miejsce protonów wpływa na właściwości redoksove katalizatorów. W reakcji utleniania powstaje cyklooktanon jako główny produkt i w mniejszych ilościach cyklooktanol.  $H_3PMo_{12}O_{40}$  wykazuje wysoką aktywność w badanej reakcji. Wprowadzenie atomów kobaltu do heteropolikwasu tylko w niewielkim stopniu poprawia aktywność katalityczną. Z kolei  $H_3PW_{12}O_{40}$ , jako mocny kwas, wykazuje najniższą spośród badanych katalizatorów aktywność w badanej reakcji. Natomiast ze wzrostem zawartości atomów kobaltu wzrasta aktywność katalityczna, która w przypadku soli  $Co_3(PW_{12}O_{40})_2$  jest prawie trzykrotnie większa w porównaniu z wyjściowym kwasem. Otrzymane wyniki zostały potwierdzone za pomocą cyklicznej woltamperometrii.

Wyznaczanie potencjałów redukcji heteropolikwasów oraz soli kobaltowych heteropolikwasów metodą cyklicznej woltamperometrii potwierdziły wprowadzenie kobaltu do struktury Keggina. Badania te wskazują również, że wprowadzenie metalu w miejsce protonu powoduje zmianę właściwości redoksowych heteropolizwiązków. Powoduje to powstanie dodatkowego centrum aktywnego w cząsteczce heteropolikwasu, co prawdopodobnie jest przyczyną wzrostu jego aktywności katalitycznej.

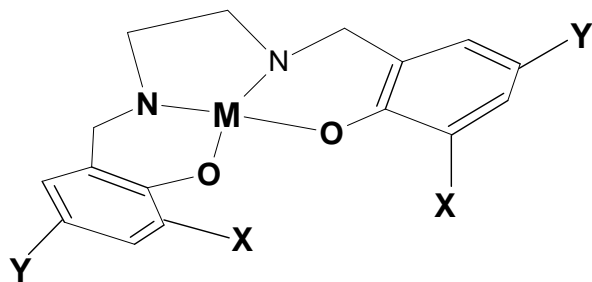
## 2.7. Synteza i badanie właściwości katalitycznych makrocyklicznych kompleksów salenowych w procesie utleniania węglowodorów

(prof. Jerzy Haber, dr Jan Poltowicz)

Utlenianie cykloalkanów jest jednym z najważniejszych procesów prowadzonych na dużą skalę w przemyśle i jedną z najbardziej interesujących transformacji w chemii organicznej. Jako katalizatory tych procesów stosowano różne rodzaje makrocyklicznych kompleksów takie jak metaloporfiryny, metaloftalocyjaniny i metalosaleny. Główną przeszkodą w stosowaniu tych kosztownych katalizatorów jest problem z ich odzyskiwaniem i ponownym użyciem. Wiele różnych metod stosowano, aby rozwiązać ten problem. Jedną z prostszych metod jest fluorowa kataliza dwufazowa, która pozwala na łatwe oddzielenie katalizatora od mieszaniny reakcyjnej.

Zsyntezowano kompleksy salenowe [N,N-bis(salicylideno)ethlenodwuaminy] manganu, żelaza i kobaltu oraz ich pochodne perfluorowane i scharakteryzowano różnymi metodami spektroskopowymi takimi jak FT-IR, UV-Vis, NMR i EPR.

Zbadano aktywność katalityczną dwóch serii katalizatorów w procesie utleniania cyklooktanu tlenem molekularnym: kompleksów salenowych z różnymi metalami i metalokompleksów z różnymi podstawnikami (Rys. 1). Wszystkie kompleksy były aktywne w procesie utleniania a głównymi produktami były cyklooktanon i cyklooktanol.



Rys 1. Struktura badanych salenowych metalokompleksów (gdzie M = Mn, Fe, Co)

| X                              | Y                              |
|--------------------------------|--------------------------------|
| H                              | H                              |
| H                              | C <sub>8</sub> F <sub>17</sub> |
| t-butyl                        | C <sub>8</sub> F <sub>17</sub> |
| t-butyl                        | t-butyl                        |
| C <sub>8</sub> F <sub>17</sub> | C <sub>8</sub> F <sub>17</sub> |

Wszystkie kompleksy z podstawnikami ściągającymi elektrony jak i donującymi elektrony wykazują większą aktywność katalityczną niż kompleks salenowy MnSalen bez podstawników. Najbardziej aktywny był kompleks MnSalen(C<sub>8</sub>F<sub>17</sub>)<sub>4</sub> z czterema podstawnikami ściągającymi elektrony. Zaobserwowano nowe zjawisko, że salenowe kompleksy perfluorowane wykazują różną rozpuszczalność w substracie w zależności od temperatury. MnSalen i kompleks z podstawnikami t-butylowymi są dobrze rozpuszczalne w substracie w temperaturze pokojowej chociaż kompleksy z podstawnikami perfluorowymi są całkowicie nierozpuszczalne i rozpuszczają się dopiero po ogrzaniu. MnSalen(C<sub>8</sub>F<sub>17</sub>)<sub>4</sub> był trzykrotnie odzyskiwany i ponownie użyty wykazując tylko nieznaczne obniżenie aktywności katalitycznej. Podobną tendencję wykazywały kompleksy żelaza i kobaltu z tymi samymi podstawnikami fluorowymi

Wprowadzenie podstawników fluorowych do pierścienia salenowego zwiększa aktywność katalityczną kompleksów salenowych. Użycie perfluorowanego kompleksu salenowego w fazie organicznej, który w temperaturze podwyższonej tworzy roztwór homogeniczny pozwala na łatwe odzyskanie katalizatora po obniżeniu temperatury.

## 2.8. Katalityczne utlenianie sadzy samochodowej

*(prof. Jerzy Haber, dr Tadeusz Machej, mgr Janusz Janas, mgr inż. Robert Janik, mgr Wojciech Rojek)*

Gazy spalinowe z silników diesla, nawet najbardziej nowoczesnych, zawierają tlenki azotu  $\text{NO}_x$  i sadzę, których emisja musi zostać ograniczona z powodu ich szkodliwego wpływu na zdrowie ludzi i środowisko naturalne.

Obowiązujące w krajach Unii Europejskiej normy emisji spalin są coraz surowsze. W roku 2008 wejdzie w życie norma Euro 5, zgodnie z którą emisja sadzy z samochodów osobowych z silnikami diesla musi zostać zmniejszona pięciokrotnie w porównaniu z wprowadzoną w 2005 roku normą Euro 4, t.j. z 0,025 do 0,005 g/km.

Zastosowanie katalizatorów do utleniania cząstek sadzy może być skutecznym sposobem ich usuwania. Katalizator powinien znacznie obniżyć temperaturę procesu – najkorzystniej do poziomu 250-300°C, tj. temperatury spalin. Ponadto, jak wykazały badania, w procesie spalania sadzy mogą brać udział cząsteczki  $\text{NO}_x$ , dodatkowo obniżając temperaturę procesu.

W roku 2006 przeprowadzono wstępną ocenę aktywności próbek katalizatorów złożonych z tlenku wanadu i potasu w reakcji utleniania sadzy, stosując metodę analizy termicznej (TG-DTA). Jako katalizatorów użyto spreparowanych w tym celu próbek  $\text{V}_2\text{O}_5$ , KV-3 ( $\text{K}_2\text{O}\cdot 3\text{V}_2\text{O}_5$ ), KV-4 ( $\text{K}_2\text{O}\cdot 4\text{V}_2\text{O}_5$ ) oraz KV-5 ( $\text{K}_2\text{O}\cdot 5\text{V}_2\text{O}_5$ ), które mieszano z sadzą syntetyczną Printex U (Degussa), przypominającą sadzę z silników diesla.

Na podstawie przeprowadzonych badań stwierdzono, że wszystkie katalizatory mogą być przedmiotem dalszych, szczegółowych badań; ich stosowanie obniża znacznie temperaturę spalania sadzy. Wartości temperatur, w której proces ten biegnie z największą szybkością dla badanych katalizatorów mieściły się w granicach 370-385°C. Najlepszym katalizatorem do utleniania sadzy okazał się katalizator o najmniejszej zawartości potasu – KV-5 ( $\text{K}_2\text{O}\cdot 5\text{V}_2\text{O}_5$ ).

Kolejnym etapem były badania prowadzone w reaktorze przepływowym, w których zastosowano badane w poprzednim roku katalizatory osadzone na monolitycznych nośnikach kordierytowych, przy czym równocześnie wprowadzano na nie sadzę. Przebieg reakcji katalitycznej rejestrowano mierząc stężenie dwutlenku węgla w funkcji temperatury (warunki politermiczne) oraz czasu (warunki izotermiczne).

Badania w warunkach izotermicznych (350°C) prowadzono przy natężeniu przepływu gazu reakcyjnego (o zawartości tlenu ok. 10 %) równym 130 dm<sup>3</sup>/h.

Badania w warunkach politermicznych prowadzono przy szybkości podnoszenia temperatury o 10°C/min. oraz przy natężeniu przepływu gazu reakcyjnego (o zawartości tlenu ok. 10 %) równym 80 dm<sup>3</sup>/h. Badania prowadzono do osiągnięcia temperatury 700°C.

Badano również wpływ obecności tlenku azotu w gazach reakcyjnych na przebieg procesu utleniania sadzy. Zawartość NO w gazach reakcyjnych wynosiła 1000 ppm; przed wprowadzeniem gazu na badaną próbkę NO był utleniany do  $\text{NO}_2$  na katalizatorze Pt/ $\text{Al}_2\text{O}_3$  (0,2 % Pt).

Eksperymenty przeprowadzone w reaktorze katalitycznym wykazały dużą zgodność z wynikami analizy termicznej. Wartości temperatur, w których przebieg procesu spalania był najszybszy mieściły się w zakresie 360-400°C. Dodatek tlenku azotu powodował obniżenie tej temperatury na katalizatorach KV-3, KV-4 i KV-5 o około 20°C. Brak takiego obniżenia temperatury w przypadku  $\text{V}_2\text{O}_5$  może świadczyć o istotnej roli potasu w procesie utleniania sadzy.

## 2.9. Stałe superkwasy oraz nowe peroxo-związki Mo(VI), W(VI) i V(V) - synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne

(prof. Wiesław Łasocha, dr Maciej Grzywa)

W ramach przeprowadzonych prac otrzymano nowe związki nadtlenowe z grupy tetraeperokso, tj:  $\text{Na}_2[\text{W}(\text{O}_2)_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2[\text{W}(\text{O}_2)_4] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  oraz (3,4-dimetylo-pirydyna) $_2$ [Mo(O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>]. We wszystkich badanych połączeniach centralny atom W(VI) i Mo(VI) otoczony jest przez cztery grupy nadtlenowe. Aniony mają symetrię zniekształconego dwunastościanu, w przybliżeniu -42m.

Drugą badaną grupą związków były dwurdzeniowe związki nadtlenowe. Otrzymano pięć nowych połączeń: (2-MepyH,NH<sub>4</sub>){O[MoO(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sub>2</sub>} /Mepy=metylopirydyna/, (2-MepyH,Na){O[MoO(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sub>2</sub>}, K<sub>2</sub>{O[MoO(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sub>2</sub>}·2H<sub>2</sub>O, Rb<sub>2</sub>{O[MoO(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sub>2</sub>}, Rb<sub>2</sub>{O[WO(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sub>2</sub>}. Na obecnym etapie prac rozwiązano struktury krystaliczne trzech związków, dla soli rubidowych wyznaczono parametry sieciowe, ustalono grupę przestrzenną oraz wyznaczono wstępne modele strukturalne w oparciu o metodę globalnej optymalizacji.

Zsyntezowano nowy związek typu diperoksoheptamolibdenianu: (NH<sub>4</sub>)<sub>3</sub>(C<sub>7</sub>NH<sub>10</sub>)<sub>3</sub>[Mo<sub>7</sub>O<sub>22</sub>(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>·4H<sub>2</sub>O, w którym dwa terminalne atomy tlenu zostały zastąpione dwiema grupami nadtlenowymi.

Wykonano badania analityczne oraz IR otrzymanych związków w celu wyznaczenia zawartości oraz potwierdzenia obecności grup nadtlenowych. Proszkowe pomiary dyfrakcyjne wykonano w celu określenia stabilności połączeń w temperaturze pokojowej. Przeprowadzono również badania termogravimetryczne.

Związki nadtlenowe dwurdzeniowe charakteryzują się większą stabilnością w temperaturze pokojowej niż mono-rdzeniowe związki typu tetraeperokso. Podczas ogrzewania są trwałe do około 60°C. W przypadku związku (2-MepyH,NH<sub>4</sub>){O[MoO(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sub>2</sub>} zaobserwowano gwałtowny rozkład – eksplozję w temperaturze ok. 100°C. W tabeli przedstawiono wyniki podstawowych badań krystalograficznych otrzymanych związków nadtlenowych.

| związek   | parametry sieciowe  | SPGR                    | V, Z               |
|---|---|-------------------------|--------------------|
| $\text{Na}_2[\text{W}(\text{O}_2)_4] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$   | a=6.9517(1), b=10.4832(2),<br>c=14.0540(3), β=74.680(1)                                 | P2 <sub>1</sub> /c (14) | V=987.81(3)<br>4   |
| $\text{Na}_2[\text{W}(\text{O}_2)_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$   | a = 9.1180(2), b = 8.6230(1)<br>c = 12.4000(2), β = 93.9040(8)                          | P2 <sub>1</sub> /c (14) | 972.68(3)<br>4     |
| $\text{K}_2\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]\}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$                | a=6.2745(2), b=9.7279(3),<br>c=11.2976(3), α=78.7430(10)<br>β=80.1900(10) γ=73.1300(10) | P-1 (2)                 | V=642.44(3)<br>2   |
| (2-MepyH,NH <sub>4</sub> ){O[MoO(O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O] <sub>2</sub> }                 | a=6.733(5), b=8.364(5)<br>c=13.984(5), α=73.702(5) β=87.647(5)<br>γ=85.216(5)           | P-1 (2)                 | V=753.1(8)<br>2    |
| (2-MepyH,Na){O[MoO(O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O] <sub>2</sub> }                               | a=6.765(5) b=8.421(5)<br>c=13.815(5), α=74.203(5)<br>β=84.775(5), γ=71.371(5)           | P-1 (2)                 | V=717.6(7)<br>2    |
| $\text{Rb}_2\{\text{O}[\text{MoO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]\}_2$   | 8.120(3), 12.547(3), 6.286(2),<br>93.31(2), 105.16(3), 105.34(2)                        | P-1 (2)                 | V=592.0(2)<br>2    |
| $\text{Rb}_2\{\text{O}[\text{WO}(\text{O}_2)_2\text{H}_2\text{O}]\}_2$  | 8.145(2), 12.460(3), 6.348(2),<br>92.30(2), 104.98(2), 105.61(2)                        | P-1 (2)                 | V=595.2(2)<br>2    |
| $(\text{NH}_4)_3(\text{C}_7\text{NH}_{10})_3[\text{Mo}_7\text{O}_{22}(\text{O}_2)_2] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ | a=14.0468(3), b=26.9834(6),<br>c=11.7937(3) β=102.0397(10)°                             | C2/c (15)               | V=4371.84(17)<br>4 |



## 2.10. Synteza i właściwości nowych katalizatorów zeolitowych do procesów transformacji węglowodorów alkiloaromatycznych i terpenowych”

(prof. Bogdan Sulikowski, dr inż. Rafał Rachwałik, dr Ewa Włoch, mgr inż. Urszula Filek, mgr Łukasz Mokrzycki)

Zeolit o strukturze ferierytu (FER) posiada bardzo interesujące właściwości i jest materiałem niezwykle przydatnym do syntezy katalizatorów zarówno o charakterze kwasowo-zasadowym, jak i redokсовym. Badano szczegółowo przebieg dealuminiowania ferierytu za pomocą HCl, stosując szereg metod, przede wszystkim MAS NMR w ciele stałym ( $^{29}\text{Si}$ ,  $^{27}\text{Al}$  i  $^1\text{H}$ ) oraz FT IR. Opracowano procedurę dealuminiowania ferierytu pozwalającą na usunięcie do 53% sieciowego glinu. Badania metodą  $^{29}\text{Si}$  MAS NMR wykazały, że HCl atakuje i usuwa w sposób preferencyjny glin znajdujący się w sąsiedztwie atomów Si w miejscach typu  $T_B$ . Atomy glinu w tych pozycjach znajdują się w 10-członowych pierścieniach budujących główny kanał ferierytu. Natomiast bardziej ukryte atomy glinu w pozycjach typu  $T_A$  (czyli w 5- i 6-członowych pierścieniach), były dużo bardziej odporne na proces dealuminiowania kwasem. Otrzymane próbki testowane w reakcji izomeryzacji  $\alpha$ -pinenu w fazie ciekłej. Stwierdzono, że nawet nieznaczne dealuminiowanie daje w efekcie aktywne katalizatory zawierające centra kwasowe Brønsteda i Lewisa (b. wysoka konwersja  $\alpha$ -pinenu w 363 K). Wykazano, że początkowe szybkości transformacji  $\alpha$ -pinenu na katalizatorach ferierytowych przewyższają inne znane dotąd systemy, np. heteropolikwas HPW osadzony na  $\text{SiO}_2$  i  $\text{ZrO}_2/\text{H}_2\text{SO}_4$ .

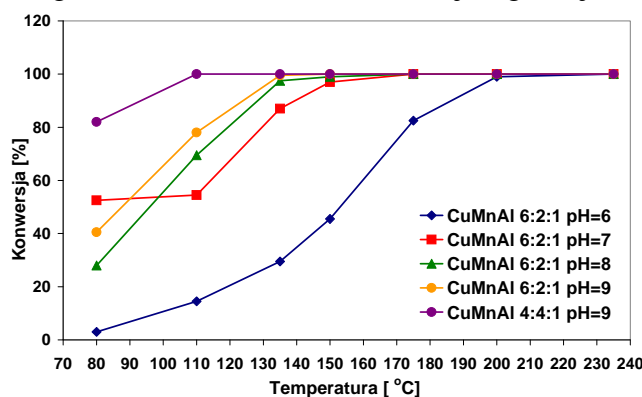
Katalizatory nowego typu otrzymano przez impregnację MCM-41 solami galu i niobu. Otrzymane w taki sposób materiały scharakteryzowano za pomocą XRD, spektroskopią FT IR oraz Ramana. Stwierdzono obecność wysoko zdyspergowanych *species* typu  $\text{NbO}_x$  i  $\text{GaO}_x$  w materiałach mezoporowatych. Osadzenie połączeń tlenkowych galu generuje w próbkach właściwości o charakterze zasadowo-redokсовym. Wykazano, że wprowadzenie połączeń galu i niobu do matrycy mezoporowatych krzemionkowych prowadzi do aktywnych selektywnych katalizatorów utleniania cykloheksenu. Najwyższą selektywność otrzymywania odpowiedniego epoksydu, dla tej samej konwersji cykloheksenu, stwierdzono dla układów zawierających równocześnie dwa metale (Nb/Ga/MCM-41), co wskazuje na synergizm oddziaływania niob-gal. Pożądana jest również odpowiednia izolacja aktywnych połączeń metali, co uzyskano przez ich rozproszenie w matrycy MCM-41 o wysokiej powierzchni. Próbki impregnowane solami niobu wykazują dużo wyższe stopnie konwersji cykloheksenu niż te osadzone na czystych nośnikach tlenkowych, co wynika z wysokiej powierzchni właściwej materiałów mezoporowatych.

Stosując metodę wymiany jonowej w ciele stałym (*contact-induced ion exchange*), otrzymano katalizatory typu Cu-ZSM-5, które wykazały bardzo wysoką aktywność w bezpośrednim utlenianiu benzenu do fenolu w fazie gazowej, przy zastosowaniu zarówno czystego tlenu, jak i mieszanin tlen-wodór w roli utleniaczy. W szczególności, katalizator typu ZSM-5 zawierający 100 % wprowadzonej miedzi, wykazywał wzrastającą wraz z temperaturą (do 400°C) wydajność fenolu, osiągając wartość ok. 10 %, co stanowi dwukrotnie więcej, niż wydajność opisana dotąd w literaturze źródłowej. Badania wykazały, że optymalizacja wydajności fenolu wydaje się skorelowana z występowaniem *species* Cu o ograniczonej wielkości, oraz że obecność wodoru w substratach może wywierać dodatni lub ujemny wpływ na aktywność katalityczną, zależnie od zawartości miedzi w próbce.

## 2.11. Spalanie zanieczyszczeń organicznych na katalizatorach otrzymanych z minerałów warstwowych

(prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, dr inż. Małgorzata Zimowska, dr inż. Roman Dula, inż. Daria Napruszewska, mgr Justyna Plona, mgr Jerzy Podobiński, dr Tadeusz Machej, mgr Robert Janik)

Spalanie katalityczne jest jedną z najbardziej atrakcyjnych metod neutralizacji lotnych zanieczyszczeń organicznych. Tlenki Mn i Cu znane są z dobrych właściwości katalitycznych w procesach utleniania, w tym także w reakcjach spalania. Wśród prekursorów katalizatorów tlenkowych szczególnie miejsce zajmują hydrotalkity, których rozkład termiczny prowadzi do uzyskania mieszanych tlenków o unikatowych właściwościach. Z tego względu postanowiono otrzymać tlenkowe katalizatory Cu-Mn wykorzystując jako prekursor hydrotalkity, które syntezowano dodając Al jako czynnik promujący powstanie struktury hydrotalkitowej. Zamierzony stosunek atomowy wynosił 6:2:1 a pH syntezy ustalano w zakresie 6-9. Wszystkie preparaty, oznaczone CuMnAl(x), gdzie x=pH syntezy, wykazywały strukturę hydrotalkitu. Próbką CuMnAl(6) zawierała ponadto fazę podwójnej soli warstwowej  $\text{Cu}_2(\text{OH})_3(\text{NO}_3)$ . Analiza chemiczna wykazała, że osad strącony przy najniższym stosowanym pH zawierał tylko połowę zamierzonej ilości manganu. Zawartość Mn wzrastała w miarę wzrostu pH syntezy. Analiza rentgenograficzna mieszanych tlenków otrzymanych przez kalcynację w temperaturze  $450^\circ\text{C}$  przez 3 godz. wykazała, że jedyną krystaliczną fazą widoczną we wszystkich próbkach jest CuO, którego refleksy traciły na intensywności w miarę wzrostu zawartości Mn. Analiza HRTEM wykazała, że obok CuO w preparatach obecne są nanokrystality spinelu  $\text{Cu}_{1.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$  lub  $\text{CuMn}_2\text{O}_4$ . Ze względu na stosunkowo dużą zawartość miedzi, można przypuszczać, że preferowane jest tworzenie spinelu  $\text{Cu}_{1.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ . Najprawdopodobniej, obserwowane zmniejszenie intensywności refleksów CuO, towarzyszące wzrostowi zawartości manganu, jest związane ze rosnącym zaangażowaniem miedzi w tworzenie fazy spinelowej. Nie obserwuje się tworzenia odrębnej fazy zawierającej glin, natomiast analiza EDX sugeruje, że Al może być obecne w postaci amorficznej fazy tlenkowej. Wszystkie kalcynowane materiały mają powierzchnie właściwe rzędu  $80\text{-}90\text{ m}^2/\text{g}$ , za wyjątkiem CuMnAl(6), którego powierzchnia właściwa wynosi ca.  $60\text{ m}^2/\text{g}$ . Testy katalityczne wykazały, że wszystkie próbki są bardzo aktywne w spalaniu toluenu, osiągając 100% konwersji w zakresie  $130\text{-}180^\circ\text{C}$ . Aktywność rośnie w kolejności CuMnAl(6)<CuMnAl(7)<CuMnAl(8)<CuMnAl(9). Ponieważ najwyższą aktywność osiągnięto dla katalizatora zawierającego największą ilość Mn a najmniej CuO, postawiono



Rys. 1 Zależność konwersji toluenu od temperatury reakcji spalania

hipotezę, że to faza spinelowa jest w badanych układach mieszanych tlenków najbardziej aktywna katalitycznie. Aby to zweryfikować, otrzymano prekursor hydrotalkitowy o stosunku atomowym Cu:Mn:Al=4:4:1, w którym stosunek Cu:Mn jest taki, jak w spinelu  $\text{Cu}_{1.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ . Katalizator otrzymany z tego prekursora wykazywał w XRD wyłącznie refleksy charakterystyczne dla słabo krystalicznego spinelu, bez śladu CuO. W teście katalitycznym okazał się najaktywniejszy ze wszystkich badanych

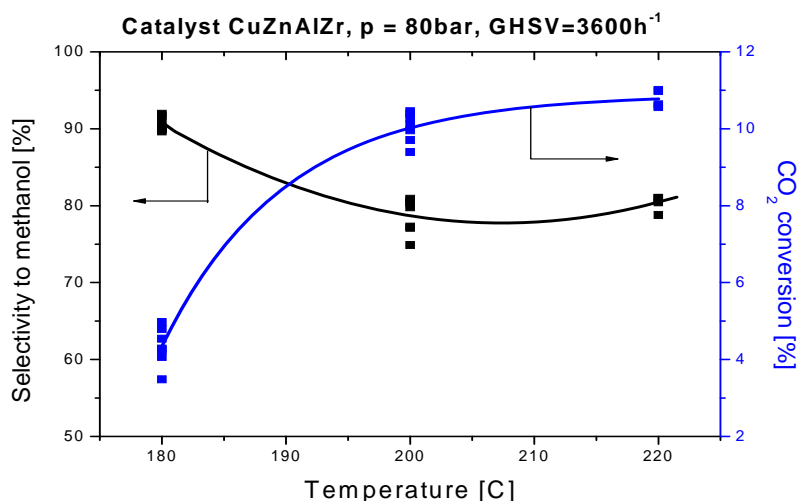
## 2.12 Uruchomienie wysokociśnieniowej aparatury do syntezy metanolu z gazu syntezowego

(doc Ryszard Grabowski, prof. Ewa Serwicka-Bahranowska, mgr Michał Śliwa)

W 2007 roku uruchomiono wysokociśnieniowy reaktor przepływowy, a następnie rozpoczęto wstępne eksperymenty dotyczące syntezy metanolu i jednoetapowej syntezy eteru dimetylowego (DME). Celem tych badań było sprawdzenie poprawności działania reaktora oraz wybór najlepszych warunków reakcji, w których badane będą katalizatory do syntezy metanolu i DME.

Prace rozpoczęto od kalibracji chromatografu gazowego pod kątem analizowanych reagentów: CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>OH, CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>.

Proces syntezy metanolu z mieszaniny H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> prowadzony był w zakresie temperatur 180-220°C, pod ciśnieniem 80 bar, GHSV=3600 h<sup>-1</sup>, na katalizatorach CuZnAl czystych oraz zawierających cyrkon, otrzymanych metodą hydrotalkitową. Katalizatory z serii CuZnAl różniły się warunkami preparatyki. Dla wszystkich testowanych katalizatorów w procesie syntezy metanolu ze wzrostem temperatury do 220°C, obserwuje się spadek selektywności do metanolu do 77% dla katalizatora CuZnAl i 80% dla CuZnAlZr i wzrost konwersji CO<sub>2</sub> odpowiednio do 14% i 11%. Otrzymane wyniki dla katalizatora CuZnAl są zgodne z wynikami uzyskanymi w Instytucie Inżynierii Chemicznej w Gliwicach.



Składową metaliczną katalizatora bifunkcyjnego do syntezy DME wybrano z serii katalizatorów CuZnAl i stanowił ją katalizator zsyntetyzowany przy pH=9, charakteryzujący się najwyższą selektywnością do metanolu (94%). Jako składową kwasową katalizatora bifunkcyjnego wybrano komercyjny montmorylonit (K10). Katalizator bifunkcyjny uzyskano na drodze mechanicznego wymieszania ziaren składowej metalicznej i kwasowej o wielkości 0.64-1mm. Stosunek objętościowy części metalicznej do kwasowej wyniósł 2/1.

Proces jednoetapowej syntezy DME z gazu syntezowego z 5% dodatkiem CO<sub>2</sub>, prowadzony był w przedziale temperatur 250-280°C i ciśnień 30-50 bar, GHSV=3600 h<sup>-1</sup>. Wraz ze wzrostem temperatury zaobserwowano wzrost selektywności do DME, która w temperaturze 280°C i p=50 bar osiąga 83%.

Wstępne wyniki dotyczące syntezy metanolu oraz jednoetapowej syntezy DME potwierdzają, iż reaktor wysokociśnieniowy wraz chromatografem gazowym działają poprawnie i układ pomiarowy ten może być wykorzystany do dalszych badań katalizatorów.

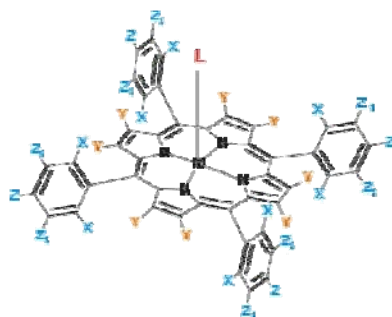
### **3. Modelowanie procesów adsorpcji i katalizy**



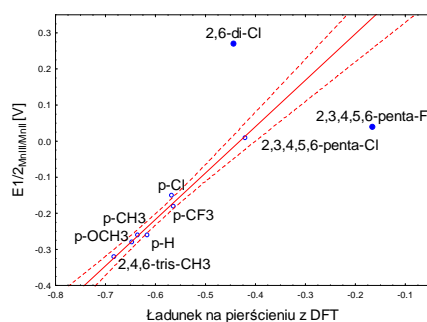
### 3.1. Badania korelacji aktywność katalityczna a struktura katalizatora na przykładzie układów porfiryńowych

(prof. Małgorzata Witko, dr Dorota Rutkowska-Żbik, dr Maciej Szaleniec, dr Renata Tokarz-Sobieraj)

Celem zadania była znalezienie korelacji pomiędzy aktywnością katalityczną (w reakcji utleniania cyklooktanu do ketonu i alkoholu) a strukturą elektronową i geometryczną metaloporfiryn manganowych. W badaniach teoretycznych uwzględniono zmianę: ligandu aksjalnego ( $L=F, Cl, Br, I, OH, CH_3COO$ ), podstawników pierścieni fenyłowych ( $Z=H, Cl, CH_3, OCH_3CF_3, Z1=Cl, X=Cl$ ) oraz podstawników w pierścieniu tetrapirołowym ( $Y=Cl, Br$ ) w tetrafenylporfiryinach (Rys. 1). Dodatkowo zbadano wpływ stopnia utlenienia Mn i obecności liganda aksjalnego na proces adsorpcji tlenu molekularnego na porfiryinie. Obliczenia przeprowadzono w fazie gazowej metodą DFT, w przybliżeniu nielokalnym przy użyciu funkcjonału B3LYP.



Rys. 1. Struktura metaloporfiryny



Rys. 2. Korelacja ładunku pierścienia porfiryńowego z  $E_{1/2}$



Rys. 3. Struktura geometryczna porfiryńowego po halogenowaniu

Obliczenia dla różnych ligandów aksjalnych pozwoliły na znalezienie korelacji pomiędzy aktywnością katalityczną, a rozkładem orbitali molekularnych (różnica energii pomiędzy orbitalem HOMO i HOMO+1). Sugeruje to możliwość wstępnej redukcji porfiryńowej poprzez aktywację wiązania C-H na ligandzie aksjalnym (przejście z kwintetowego układu  $Mn^{III}P_{Cl}$  na zredukowany, sześciodobowy układ  $Mn^{II}P + HCl$ ).

Analiza wpływu stopnia utlenienia Mn i obecności liganda aksjalnego na proces adsorpcji tlenu molekularnego pokazała, że tlen adsorbuje się spontanicznie wyłącznie na zredukowanej porfiryńowej. Na kompleksie czterokoordynacyjnym  $Mn^{II}P$  może adsorbować się zarówno w geometrii side-on (dwa wiązania Mn-O) jak i end-on (jedno wiązanie Mn-O) z energią wiązania odpowiednio  $-43$  kJ/mol i  $-34$  kJ/mol. Wprowadzenie liganda aksjalnego (Cl) sprawia, że tlen molekularny wiąże się słabiej ( $-15$  kJ/mol) i tworzy się wyłącznie kompleks end-on. Utworzenie kompleksu z Mn na trzecim stopniu utlenienia jest termodynamicznie mało prawdopodobne.

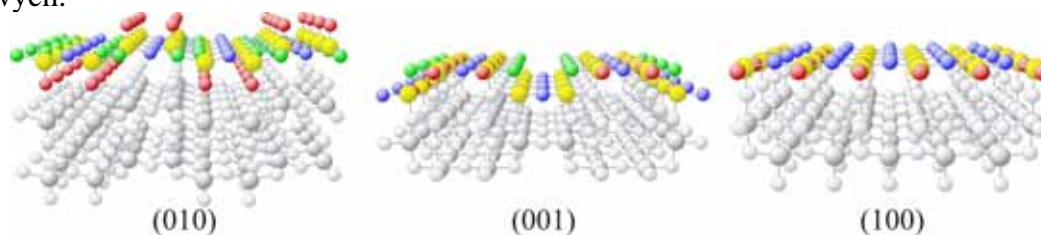
Obliczenia przeprowadzone dla porfiryń manganowych z różnymi podstawnikami w pierścieniu fenyłowym pozwoliło na znalezienie teoretycznego (możliwego do wyznaczenia w obliczeniach) parametru, jakim jest ładunek pierścienia, który z powodzeniem może być stosowany jako miara efektu indukcyjnego podstawnika/ów. Ładunek pierścienia tetrapirołowego koreluje ze zmianą wyznaczonego doświadczalnie standardowego potencjału redox  $E_{1/2} Mn^{III}/Mn^{II}$  (Rys. 2).

Modelowanie teoretyczne porfiryń z modyfikowanym pierścieniem tetrapirołowym, pokazały, że halogenowanie (Cl, Br) układu prowadzi do dużych zmian geometrycznych (wygięcie układu) Rys. 3.

### 3.2. Adsorpcja atomów i cząsteczek na powierzchniach tlenków metali przejściowych. Modelowanie metodami chemii kwantowej.

(prof. Małgorzata Witko, mgr Paweł Hejduk, mgr Jakub Goclon)

Kontynuowano teoretyczne badania nad właściwościami adsorpcyjnymi centrów O i V obecnych na nisko-indeksowych powierzchniach pięciotlenku wanadu. Obliczenia wykonano przy pomocy modelu klasterowego i periodycznego. Reakcjami próbnymi były adsorpcja jednego lub dwóch atomów wodoru na centrach powierzchniowych. Dodatkowo stosując modelowe obliczenia periodyczne zbadano redukowalność powierzchni (010), (001) i (100) (Rys. 1) oraz związaną z tym ich relaksację zakładając tworzenie się na nich wakancji tlenowych.

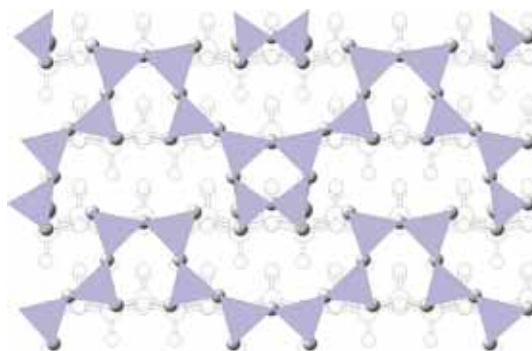


Rys. 1. Nisko-indeksowe powierzchnie  $V_2O_5$

Obliczenia wykonano metodą DFT w przybliżeniu gradientowym (GGA) wykorzystując obliczeń klasterowych program StoBe oraz do obliczeń periodycznych program VASP. Energie adsorpcji bądź tworzenia wakancji tlenowych wyznaczono z różnic energii całkowitych odpowiednich układów.

Z obliczeń klasterowych wynika, że atom H ulega silniejszej stabilizacji na powierzchniach niewysyconych (001) i (100) ( $E_{\text{ads}}$  od -2.6 do -3.6 eV) w porównaniu z płaszczyzną wysyconą (010) ( $E_{\text{ads}}$  od -1.9 do -2.3 eV). Drugi atom wodoru adsorbowany jest również silniej na płaszczyznach (001) i (100) ( $E_{\text{ads}}$  od -5 eV do 6.3 eV) niż na powierzchni (010) ( $E_{\text{ads}}$  od -2.9 eV do -3.9 eV). Zatem niewysycone powierzchnie  $V_2O_5$  wykazują potencjalnie wyższą aktywność w procesie aktywacji molekuly organicznej.

Z obliczeń periodycznych tworzenia wakancji O wynika mocne związanie atomów tlenu z powierzchnią, przy czym energie wiązań są większe dla wysyconej powierzchni (010) ( $E_b$  od 5 do 7 eV) niż dla płaszczyzn o charakterze niewysyconym ( $E_b$  od 3.5 do 4.2 eV). Dla płaszczyzn (001) i (100) obserwuje się obniżenie energii tworzenia wakancji tlenowych w miarę wzrostu superkomórki, czyli gdy stężenie wakancji na powierzchni maleje. Procesowi tworzenia wakancji towarzyszy silna relaksacja powierzchni, która w przypadku płaszczyzn niewysyconych koordynacyjnie prowadzi do utworzenia nowych połączeń pomiędzy sąsiadującymi warstwami atomowymi w kierunku [010]. Relaksacja dla największych superkomórek wskazuje na powstawania struktury zbliżonej do amorficznej (Rys. 2)



Rys. 2. Struktura amorficzna powstała podczas relaksacji powierzchni zredukowanej.

### 3.3. Kinetyka utleniającego odwodornienia propanu na katalizatorach VMgO i KVMgO

(doc Ryszard Grabowski, Irena Gressel, mgr Michał Śliwa)

Katalizatory zawierające wanad wykazują interesujące właściwości w reakcjach selektywnego utleniania węglowodorów w tym w reakcji utleniającego odwodornienia (ODH) alkanów, które to reakcje wzbudzają zainteresowanie ze względu na możliwość wykorzystania ich jako źródła tanich olefin. Jednym z takich katalizatorów jest tlenek wanadu naniesiony na MgO, który jest katalizatorem interesującym z naukowego punktu ze względu na inny rozkład produktów niż katalizatory badane wcześniej, takie jak  $\text{VO}_x/\text{TiO}_2$ ,  $\text{VO}_x/\text{SiO}_2$ , czy też  $\text{VO}_x/\text{CeO}_2$ .

Dane doświadczalne będące podstawą obliczeń były otrzymane dla reakcji ODH propanu prowadzonej w reaktorze całkowym na katalizatorze 1mlnVMgO i 1mlnVKMgO w przedziale konwersji ( $X_p$ )  $0 < X_p < 0.3$ . Umożliwiło to wyznaczenie poszczególnych stałych szybkości dla szerokiego przedziału zmienności temperatury, stężenia propanu oraz czasu kontaktu.

Modele Langmuira –Hinshelwooda (L-H), ER-SSAM (Eley–Rideal - Steady State Adsorption Model) oraz MK (Mars van Krevelen) zostały zastosowane do opisu tej reakcji.

W poniższej tabeli zostały podane obliczone wartości aktywacji energii oraz czynnika przed-ekspotencjalnego dla poszczególnych etapów reakcji ODH propanu, otrzymane poprzez dopasowanie modelu, który najlepiej opisywał dane doświadczalne (ER-SSAM) do danych doświadczalnych. Oba modele ER-SSAM-1 (reakcja spalania jest pierwszego rzędu względem pokrycia tlenem) czy też ER-SSAM-2 (reakcja spalania jest drugiego rzędu względem pokrycia tlenem) opisują dane doświadczalne z podobną dokładnością i różnice pomiędzy nimi są niewielkie.

| Katalizator    | $k_1$   |       | $k_2$   |       | $k_3$   |       | $k_{os}$   |          | Błąd [%] |
|----------------|---------|-------|---------|-------|---------|-------|------------|----------|----------|
|                | $k_1^0$ | $E_1$ | $k_2^0$ | $E_2$ | $k_3^0$ | $E_3$ | $k_{os}^0$ | $E_{os}$ |          |
| <b>PROPANE</b> |         |       |         |       |         |       |            |          |          |
| <b>VMgO</b>    | 140     | 13    | 380     | 9     | 230     | 12    | 13600      | 14       | 5.1      |
| <b>KVMgO</b>   | 24      | 12    | 400     | 5     | 150     | 11    | 58000      | 17       | 6.8      |
| <b>VMgO</b>    | 140     | 13    | 400     | 9     | 210     | 12    | 36550      | 12       | 5.1      |
| <b>KVMgO</b>   | 50      | 13    | 41100   | 17    | 11      | 11    | 72150      | 17       | 7.2      |

\*energia aktywacji – kJ/mol

Na podstawie otrzymanych wyników można sformułować następujące wnioski dotyczące reakcji utleniającego odwodornienia na katalizatorach VMgO i VMgO .

1. Spośród badanych modeli, model ER-SSAM najlepiej opisuje reakcję ODH propanu na tych katalizatorach.
2. Produkty spalania tworzą się głównie w reakcji następczego spalania propenu. Udział spalania równoległego propanu jest mały i zależy od składu mieszaniny reakcyjnej i temperatury.
3. W reakcji ODH bierze jedynie jeden rodzaj tlenu (tlen nukleofilowy z powierzchni katalizatora).
4. Dodatek metalu alkalicznego prowadzi do wzrostu selektywności do produktów pełnego spalania głównie w wyniku wzrostu udziału spalania następczego propylenu.
5. Pozostaje sprawą nierozstrzygniętą czy model ER-SSAM-1 czy też model ER-SSAM-2 lepiej opisuje tą reakcję.



### **3.4. Symulacje komputerowe kinetyki adsorpcji jonów wodorowych na granicy faz tlenek metalu / elektrolit**

*(prof. Władysław Rudziński, dr Piotr Zarzycki, dr hab. Wojciech Piasecki)*

Adsorpcja jonów wodorowych jest podstawowym mechanizmem odpowiedzialnym za powstawanie podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz tlenek/roztwór elektrolitu. Bardzo słabo poznanym aspektem tego procesu jest kinetyka adsorpcji protonów.

W naszych badaniach zastosowaliśmy technikę symulacji KMC (Kinetic Monte Carlo) do badania kinetyki adsorpcji jonów wodorowych na tlenkach metali. Szczegółowo został zbadany wpływ parametrów opisujących układ (gęstość miejsc adsorpcyjnych, stała dielektryczna, energetyczna niejednorodność powierzchni tlenku) na ewolucję czasową pokrycia powierzchni. Okazało się, że wielkości kinetyczne są znacznie bardziej wrażliwe na oddziaływania pomiędzy zaadsorbowanymi protonami niż wielkości równowagowe. Założenie, że w układzie występuje energetyczna heterogeniczność powierzchni gwałtownie zmienia zarówno skalę czasową w jakiej zachodzi cały proces adsorpcji, jak również odstępy czasu pomiędzy kolejnymi, elementarnymi procesami adsorpcji/desorpcji.

Do opisu otrzymanych z symulacji krzywych kinetycznych zastosowaliśmy dwa modele kinetyczne: klasyczny ART (Absolute Rate Theory) oraz nowy SRT (Statistical Rate Theory). Niestety żaden z nich nie był w stanie poprawnie opisać otrzymanych danych. Prawdopodobnie wynika to z dwóch przyczyn. Zastosowany w symulacjach model mikroskopowy granicy faz tlenek/roztwór elektrolitu jest uproszczony i może nie uwzględniać istotnych dla kinetyki adsorpcji jonów zjawisk. Z drugiej strony użyte modele kinetyczne traktują oddziaływania elektrostatyczne, które są bardzo ważne w adsorpcji jonów, w sposób przybliżony. Obecnie chcemy zająć się zbadaniem wpływu tego drugiego czynnika na opis kinetyki adsorpcji jonów wodorowych.

### 3.5. Opis teoretyczny kinetyki procesów sorpcji stosowanych w technologiach ochrony środowiska

*(prof. Władysław Rudziński)*

Adsorpcja na granicy faz ciało stałe/roztwór jest prawdopodobnie najczęściej wykorzystywanym procesem fizykochemicznym w technologiach oczyszczania wód. Z uwagi na ograniczony czasowo kontakt sorbentu z oczyszczanym roztworem, kinetyka procesu jest co najmniej równie ważna jak właściwości układu w stanie równowagi.

Badania skupiały się na teoretycznym opisie kinetyki adsorpcji na granicy faz ciało stałe/roztwór przy użyciu Statystycznej Teorii Transportu międzyfazowego (SRT). Wykazano, że często używane pseudo-pierwszorzędowe równanie Lagergrena może być stosowane jedynie do analizy danych eksperymentalnych zmierzonych w układach adsorpcyjnych znajdujących się blisko stanu równowagi. Wynika to z faktu, iż równanie Lagergrena jest formą graniczną bardziej ogólnych równań kinetycznych, wywodzących się z modeli zakładających, że szybkość adsorpcji jest kontrolowana przez (1) dyfuzję sorbatu wewnątrz porów sorbentu (2) kinetykę reakcji powierzchniowych. Interpretacja teoretyczna stałych pojawiających się w równaniu Lagergrena jest różna, w zależności od przyjętego modelu (dyfuzji wewnątrzcząstkowej lub też reakcji powierzchniowej). Porównanie eksperymentalnie wyznaczonych wartości stałych z wartościami przewidywanymi teoretycznie pozwoliło na stwierdzenie, jaki proces rządzi kinetyką adsorpcji w danym układzie. Rozważania teoretyczne zostały pomyślnie zweryfikowane przy pomocy analizy danych eksperymentalnych zmierzonych w dwóch układach adsorpcyjnych, tj.: barwnik MCB/trociny oraz  $\text{Cd}^{2+}$ /węgiel kostny.

Ponadto, poruszono problem używania odpowiednich modeli teoretycznych w celu poprawnego opisu efektów obserwowanych w eksperymentalnych izotermach kinetycznych. Pokazano, jaki jest wpływ warunków technicznych (czyli, np. masy adsorbentu, objętości roztworu, stężenia początkowego sorbatu) prowadzenia eksperymentu na przebieg izoterm kinetycznych. Brano pod uwagę zarówno model reakcji powierzchniowej jak i dyfuzji wewnątrzcząstkowej. Wyniki porównano z literaturowymi danymi eksperymentalnymi.

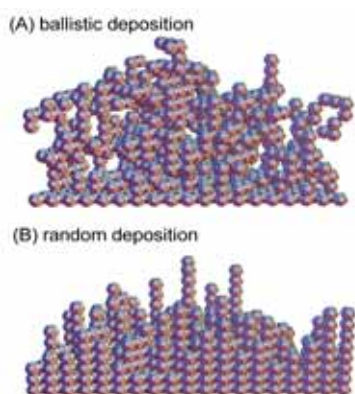
Kolejnym badanym problemem była możliwość wprowadzenia pewnych przybliżeń do podstawowego wyrażenia SRT. Celem było otrzymanie prostych, analitycznych wyrażeń, użytecznych do korelacji danych eksperymentalnych. Otrzymane przybliżenia zostały szczegółowo zbadane pod kątem ich dokładności.

### 3.6. Badania wpływu struktury fraktalnej powierzchni na dynamikę transportu w układach gaz/ciało stałe

(prof. Władysław Rudziński, dr Tomasz Pańczyk)

Kinetyka adsorpcji czy też reakcji powierzchniowych zależy od szeregu czynników. Jednym z nich jest częstotliwość kolizji molekuł gazu z powierzchnią. Rzeczywiste powierzchnie ciał stałych, z punktu widzenia ich topografii, są zazwyczaj dalekie od jakiegokolwiek struktury deterministycznej. Z tego względu trudno jest podać ogólną zależność opisującą rzeczywisty strumień molekuł docierających do powierzchni w danych warunkach ciśnienia i temperatury. Problem ten może być w pewnym stopniu rozwiązany przy zastosowaniu metod geometrii fraktalnej, gdyż wymiar fraktalny jest najbardziej ogólnym parametrem definiującym stopień i charakter geometrycznej nieregularności ciała stałego.

Przeprowadzono badania mające na celu pomiar czynnika częstotliwości zderzeń molekuł gazu z powierzchniami szorstkimi oraz podjęto próby korelacji uzyskanych wyników z wymiarami fraktalnymi badanych powierzchni. Analizowano powierzchnie uzyskane przy użyciu 2 modeli wzrostu, mianowicie: *random deposition* oraz *ballistic deposition*. Zasadnicze różnice pomiędzy użytymi modelami wzrostu odzwierciedla Rysunek 1, który przedstawia przykładowe powierzchnie uzyskane przy pomocy tych technik.

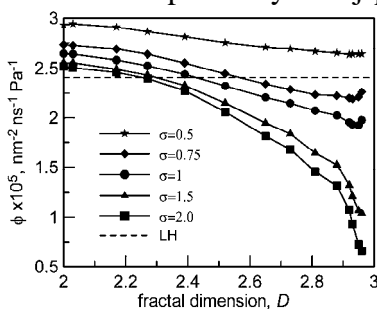


Rys. 3. Przykładowe powierzchnie

gazu. Linią przerywaną przedstawione są wartości czynnika częstotliwości obliczone przy użyciu równania Hertza-Langmuira, ważnego dla powierzchni całkowicie gładkich:

$$\phi = 1 / \sqrt{2\pi mkT}, \text{ gdzie } m - \text{masa atomu.}$$

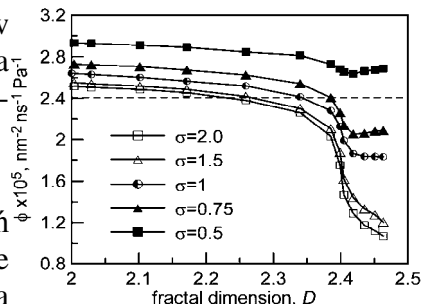
Najważniejszym wnioskiem wypływającym z badań (jest to, że czynnik częstotliwości uderzeń nie różni znacznie od wartości przewidywanej przez równanie Hertza-Langmuira



Rys. 5. Ballistic deposition

Wyznaczono wymiary fraktalne powierzchni uzyskanych w wyniku depozycji różnych ilości atomów na pierwotnej regularnej strukturze. A następnie, przy użyciu metod dynamiki molekularnej, przeprowadzono pomiary czynnika częstotliwości uderzeń atomów gazu doskonałego z tymi powierzchniami. Badania prowadzono dla różnych stosunków średnic atomów gazu i atomów tworzących powierzchnie,  $\sigma$ .

Zasadnicze wyniki badań przedstawiają Rysunki 2 i 3, gdzie zebrano zależności wartości czynnika częstotliwości od wymiaru fraktalnego powierzchni dla obu typów modelu wzrostu oraz różnych stosunków średnic atomów powierzchniowych do atomów



Rys. 4. Random deposition

nawet dla powierzchni o dużych wartościach wymiaru fraktalnego. Ma to miejsce wtedy, gdy do obliczenia wartości czynnika częstotliwości używa się rzeczywistej wartości powierzchni dostępnej dla molekuł (atomów) gazu. Zatem, możliwe jest stosowanie równania Hertza-Langmuira w modelach mikrokinetycznych. Choć takie postępowanie prowadzi do pewnych błędów, możliwe jest jednak ich oszacowanie na podstawie wyników przedstawionych na Rysunkach 2 i 3.

### 3.7. Strukturalne i elektronowe uwarunkowania właściwości metalicznych centrów aktywnych w enzymach – badania kwantowo-chemiczne

(prof. Ewa Broclawik, dr Tomasz Borowski)

W ramach tego zadania statutowego wykonywane są badania teoretyczne struktury elektronowej oraz mechanizmów reakcji dla wybranych centrów metalicznych w enzymach. Prace przeprowadzone w ubiegłym roku obejmowały kolejno następujące podzadania.

Badanie mechanizmu reakcji cyklizacji katalizowanej przez syntazę kwasu klawaminowego (CAS) (jedna praca opublikowana). Wyniki uzyskane dla tego układu przy pomocy klasycznej dynamiki molekularnej oraz kwantowo-chemicznej metody DFT (B3LYP) sugerują, że reakcja cyklizacji CAS może przebiegać według bezprecedensowego mechanizmu obejmującego fragmentację substratu do aldehydu i ylidu i ich późniejszą cyklizację.

Obliczenia metodami dynamiki molekularnej dla kompleksu enzym-substrat dla demetylazy histonowej (JMJD2A) (jedna praca opublikowana). Uzyskane wyniki potwierdziły stabilność struktur obserwowanych w kryształach oraz dostarczyły opisu dynamicznej struktury centrum aktywnego.

Kwantowo-chemiczne badania mechanizmu oksydacyjnego rozcięcia polienowego łańcucha karotenoidów katalizowanego przez oksigenazę apokarotenoidów (ACO) (jedna praca w druku). Wyniki tych badań pokazują, że dwa mechanizmy mają porównywalnej wielkości bariery reakcji, przy czym, jeden z nich lepiej tłumaczy obserwowaną specyficzność reakcji ACO.

Badanie mechanizmu reakcji utleniania cząsteczek modelowych dla leków zawierających fragment aromatyczny przez aktywną formę oksyferylową cytochromu CYP 3A4 oraz jej rdzeń reprezentowany przez  $\text{FeO}^+$  (dwie prace opublikowane, jedna wysłana do druku). Wyniki obliczeń DFT wskazują na istotną rolę niskospinowej formy żelaza w tym procesie a także pozwalają wyodrębnić czynniki odpowiedzialne za obniżenie bariery aktywacji dla insercji tlenu do wiązania C-H we fragmencie aromatycznym oraz rolę otoczenia białkowego w enzymie. Struktura niskospinowego stanu elektronowego rdzenia oksyferylowego  $\text{Fe}^{\text{IV}}\text{-O}$  w cytochromach została potwierdzona przez obliczenia skorelowane CASPT2; potwierdziło to także wiarygodność metod DFT w modelowaniu takich układów.

### 3.8. Właściwości strukturalne i elektronowe metalicznych centrów aktywnych w materiałach nanoporowatych

*(prof. dr hab. E. Broclawik, mgr P. Rejmak)*

Głównym zadaniem na rok 2007 było modelowanie kwantowo-chemiczne, z użyciem metody DFT, właściwości kationowych centrów  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{Ag}^+$  AND  $\text{Na}^+$  w zeolitach ZSM-5 oraz ich oddziaływań z cząsteczką zaadsorbowanego benzenu. Obliczenia DFT dla modeli klasterowych miały na celu wyznaczenie struktury geometrycznej oraz właściwości elektronowych trzech badanych układów. Zostały one przeanalizowane pod kątem ich wpływu na aktywację sorbowanego benzenu. Analiza NOCV (Natural Orbitals for Chemical Valence) posłużyła do określenia przyczynków różnicowej gęstości elektronowej: donacji oraz donacji zwrotnej. Pokazano, że sieć zeolitu zwiększa donację zwrotną, co zasadniczo wpływa na aktywację benzenu na centrach  $\text{Cu}^+$  oraz  $\text{Ag}^+$ .

Modelowanie DFT dla centrów  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{Ag}^+$  oraz  $\text{Na}^+$  w sieci zeolitu oraz ich oddziaływań z cząsteczką benzenu, uzupełnione analizą NOCV (orbitali naturalnych dla wartościowości chemicznej) pozwoliło lepiej zrozumieć procesy przeniesienia ładunku i ich wpływ na aktywację sorbowanej cząsteczki; rozdzielenie przepływu ładunków na donację i donację wsteczną pozwala na jego dyskusję w odniesieniu do zwiększania/zmniejszania populacji elektronowych poszczególnych orbitali molekularnych centrowanych w różnych obszarach cząsteczki. To z kolei pozwala dokładniej zrozumieć mechanizm aktywacji w wyniku adsorpcji.

Dla centrów  $\text{Cu}^+$   $\pi$ -donacja zwrotna przeważa nad donacją, dla  $\text{Ag}^+$  obydwa procesy są porównywalne, natomiast dla sodu obydwa procesy są zaniedbywalne. Porównanie z wynikami uzyskanymi dla swobodnych kationów pokazuje, że sieć zeolitu znacznie zwiększa  $\pi$ -donację zwrotną dla  $\text{Cu}^+$ , podczas gdy dla  $\text{Ag}^+$  pewna  $\pi$ -donacja zwrotna pojawia się dopiero po zanurzeniu kationu w sieci zeolitu. Dlatego aktywacja benzenu na centrach  $\text{Ag}^+$  jest znacząco słabsza niż na centrach  $\text{Cu}^+$ , co jest potwierdzone przez analizę widm IR, zarówno obliczonych jak i eksperymentalnych.

## **4. Dynamika układów nanocząstek i koloidów**



## 4.1. Wpływ kąta kolizji i szorstkości powierzchni hydrofobowej na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego

(prof. Kazimierz Małyś, inż. Marta Barańska, dr Marcel Krzan, mgr inż. Jan Zawala, mgr Anna Niecikowska, mgr Agnieszka Olszewska)

Celem zadania było określenie wpływu kąta kolizji oraz szorstkości powierzchniowej na powstawanie kontaktu trójfazowego podczas kolizji pęcherzyka powietrza z modelową, hydrofobową powierzchnią ciała stałego. Kolizja unoszącego się w czystej wodzie pęcherzyka z powierzchnią hydrofobową (Teflon) rejestrowana była przy użyciu szybkiej kamery. Wyznaczono czas utworzenia kontaktu trójfazowego ( $t_{TPC}$ ), tzn. czas od momentu pierwszej kolizji do momentu utworzenia się kontaktu, dla płytek Teflonowych różniących się szorstkością powierzchni i ustawionych pod różnymi kątami w stosunku do toru wznoszenia się pęcherzyka. Określono także zmiany prędkości oraz pulsacje kształtu pęcherzyka podczas kolizji. Szorstkość płytek Teflonowych modyfikowana była za pomocą papieru ściernego o różnej ziarnistości oraz/lub pasty diamentowej. Przygotowano następujące próbki: „Teflon I” i „Teflon II” (szorstkość poniżej  $1\mu\text{m}$ ), „Teflon III” ( $30-60\mu\text{m}$ ), „Teflon IV” ( $50-80\mu\text{m}$ ), „Teflon V” ( $80-100\mu\text{m}$ ). Wykazano, że stopień szorstkości powierzchni hydrofobowej ma decydujący wpływ na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego (czasu jego utworzenia). W zależności od stopnia szorstkości wartość  $t_{TPC}$  zmieniała się o ponad rząd wielkości (z 3 ms w przypadku Teflonu IV i Teflonu V do ok. 80 ms dla Teflonu I i II). Dla próbek o szorstkości poniżej  $1\mu\text{m}$  podczas kolizji pęcherzyka obserwowano 4 do 5 cykli „dojście-odbicie” przed utworzeniem kontaktu. W przypadku próbek o szorstkości  $50\mu\text{m}$  i większej powstanie kontaktu trójfazowego (TPC) i przyczepienie pęcherzyka następowało zawsze w trakcie

1 kolizji – nie obserwowano odbić, a  $t_{TPC}$  zawsze wynosił ok. 3ms. Ponadto, podczas pierwszej kolizji pęcherzyka z powierzchnią Teflonu III obserwowano w niektórych przypadkach, że na powierzchni w miejscu kolizji zostaje mały pęcherzyk (satellite bubble). Do kontaktu trójfazowego dochodziło, gdy podczas drugiej kolizji duży pęcherzyk uderzał w miejsce, gdzie znajdował się mały.

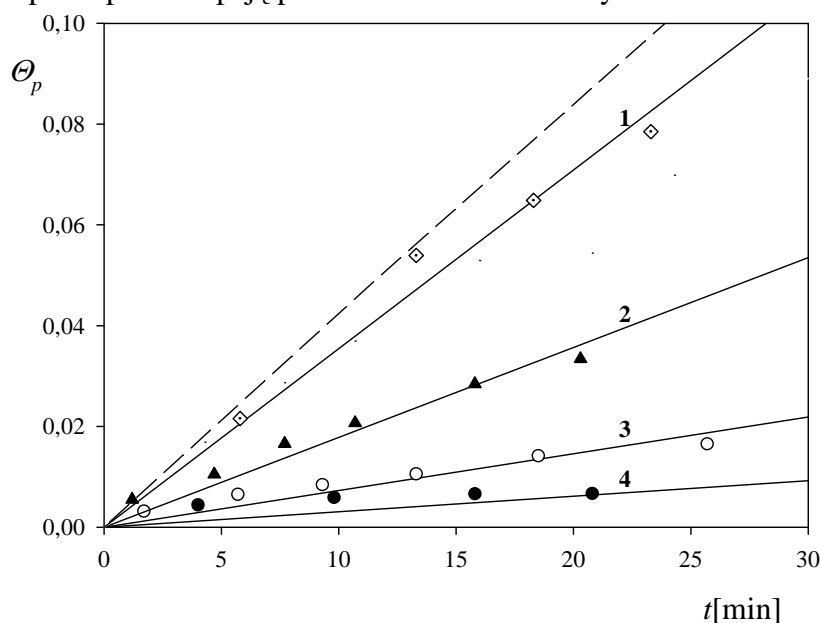
Wpływ szorstkości powierzchni związany jest najprawdopodobniej z dwoma następującymi mechanizmami: i) większa szorstkość oznacza występowanie na powierzchni większych nierówności, co zwiększa prawdopodobieństwo, że ciekły film szybciej lokalnie osiągnie krytyczną grubość pęknięcia, ii) na szorstkiej powierzchni występują rysy i nierówności, w których uwięzione może być powietrze, sprzyjające tworzeniu się większego perymetru kontaktu trójfazowego. Wyniki eksperymentów, podczas którego zmieniano kąt kolizji świadczą o tym, że drugi mechanizm jest bardziej istotny w przypadku powierzchni hydrofobowych. Płytkę teflonową (szorstkość „Teflon III”) ustawioną została pod kątem  $80^\circ$  w stosunku do toru wznoszącego się pęcherzyka. Otrzymane wartości  $t_{TPC}$  charakteryzowały się dużym rozrzutem – w 50% przypadków pęcherzyk ulegał przyczepieniu do powierzchni Teflonu podczas 2 kolizji, a  $t_{TPC}$  wynosił ok. 40 ms. Wartość ta zgadzała się dobrze z wartością otrzymaną dla kąta  $90^\circ$ . Zmniejszenie kąta kolizji do  $60^\circ$  spowodowało wydłużenie się czasu utworzenia kontaktu trójfazowego do 83 ms (obserwowano 4 kolizje pęcherzyka przed utworzeniem kontaktu). Wydłużenie czasu utworzenia kontaktu spowodowane było najprawdopodobniej tym, że przy małym kącie kolizji, pęcherzyk uderzał w powierzchnie teflonu w różnych miejscach. Eliminowało to praktycznie możliwość ponownego uderzenia pęcherzyka w miejsce, gdzie potencjalnie mógłby znajdować się „satellite bubble” pozostawiony tam podczas pierwszej kolizji. Dla dostatecznie dużych kątów prawdopodobieństwo to było znacznie większe.



## 4.2. Określenie kinetyki tworzenia oraz struktury monowarstw cząstek koloidalnych oddziaływujących potencjałem krótkozasięgowym

(prof. Zbigniew Adamczyk, dr Jakub Barbasz, mgr Anna Bratek, mgr Aneta Michna, dr Małgorzata Nattich, dr Paweł Weroński)

Oddziaływania cząstek koloidalnych i biokoloidalnych z powierzchniami granicznymi prowadzące do zjawisk adsorpcji, osadzania i adhezji mają istotne znaczenie, gdyż umożliwia optymalizację nowych technologii związanych z selektywną separacją cząsteczek DNA, protein, wirusów, komórek patologicznych, bakterii itp. Efektywność tych procesów jest często zwiększana przez użycie substancji wiążących, spełniających rolę centrów aktywnych. Głównym celem przeprowadzonych badań było więc wyznaczenie kinetyki tworzenia oraz struktury monowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych, wytwarzanych przez preadsorpcję polielektrolitów anionowych.



Rys. 1. Zależność pokrycia cząstkami lateksu  $\Theta_p$  miki modyfikowanej przez adsorpcję PEI od czasu osadzania  $t$ . Osadzanie cząstek lateksu zachodziło przy  $Re=2$  i sile jonowej  $I=10^{-3}$  M, adsorpcja PEI zachodziła przy pH 6.1-6.4,  $I=10^{-3}$  M. Pokrycia PEI były następujące: (1) (◇)  $\Theta_{PEI}=0.116$ ; (2) (▲)  $\Theta_{PEI}=0.074$ ; (3) (○)  $\Theta_{PEI}=0.055$ ; (4) (●)  $\Theta_{PEI}=0.042$ . Linie ciągłe przedstawiają proste interpolacyjne, natomiast linia przerywana przedstawia wyniki teoretyczne wyznaczone dla powierzchni homogenicznej.

Pomiary przeprowadzono dla miki modyfikowanej warstwą polietyleno iminy (PEI) o kontrolowanym pokryciu, przy użyciu naczynka przepływowego oraz suspensji lateksu polistyrenowego o średnim rozmiarze cząstek 660 nm. Na rysunku 1 pokazano przykładowe zależności kinetyczne uzyskane dla różnego stopnia pokrycia miki, przez PEI. Wyznaczoną na podstawie tych pomiarów zależność początkowej szybkości osadzania cząstek od stopnia pokrycia PEI interpretowano w oparciu o nowy model teoretyczny, uwzględniający fluktuacje gęstości ładunku elektrycznego, uzyskując ilościową zgodność. Wykazano, że dotychczas stosowana teoria DLVO, zakładająca równomierny rozkład ładunku jest nieadekwatna. Wyniki te pozwoliły również na opracowanie bardzo precyzyjnej metody wyznaczenia stężenia polielektrolitów oraz biopolimerów w roztworach wodnych.

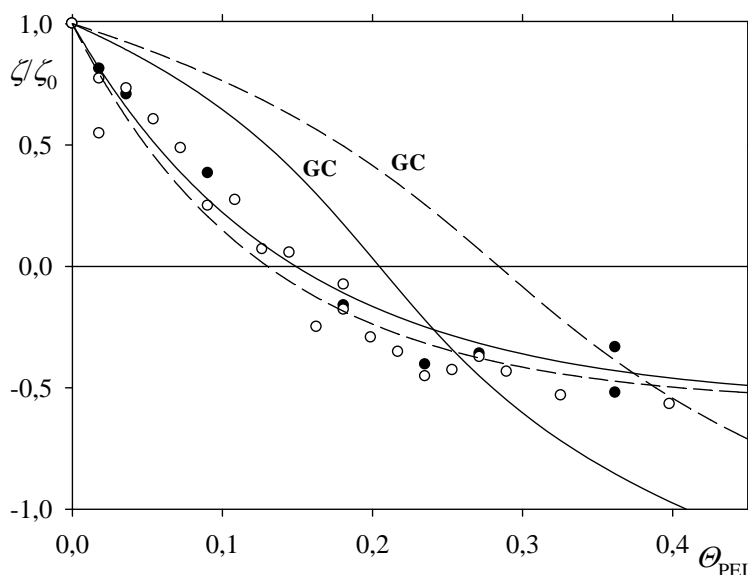
## **5. Struktury samoorganizujące i funkcjonalne warstwy powierzchniowe**



## 5.1. Określenie korelacji między konformacją i kształtem nanocząstek na powierzchniach, a potencjałem elektrokinetycznym.

(prof. Zbigniew Adamczyk, dr Maria Zembala, dr Barbara Jachimska, Elżbieta Porębska)

Nanoszenie warstewek polielektrolitów o charakterze kationowym i anionowym na powierzchnie stałe jest efektywną metodą wytwarzania substratów o określonej funkcjonalności umożliwiając selektywny wychwyt białek i innych biopolimerów. Pomimo istotnego znaczenia tych procesów, brak jest systematycznych badań, umożliwiających w sposób ilościowy mechanizmy i kinetykę adsorpcji polielektrolitów na powierzchniach stałych. Tak więc, podstawowym celem przeprowadzonych badań było opracowanie nowej metodyki badawczej, pozwalającej na precyzyjne określenie stopnia pokrycia powierzchni polielektrolitem, a także konformacji makrocząsteczki na powierzchni. Metodyka ta jest oparta na pomiarze potencjału przepływu w płasko-równoległym naczynku czteroelektrodowym. Pomiary przeprowadzono dla anionowego polielektrolitu: polietyleno iminy (PEI), której ładunek może być kontrolowany przez zmianę pH.



Rys. 1. Zależność względnego potencjału zeta  $\zeta/\zeta_0$  miki od stopnia pokrycia PEI,  $\theta_{PEI}$ , pełne i puste symbole odpowiadają adsorpcji PEI z roztworów o sile jonowej, odpowiednio:  $10^{-3}$  i  $10^{-2}$  M, pH=6.1-6.4. Linie ciągle i przerywane oznaczają wyniki teoretyczne obliczone dla siły jonowej  $10^{-2}$  i  $10^{-3}$  M, z naszego modelu oraz z modelu Gouya-Chapmana (oznaczonego jako GC).

Podstawowe parametry fizykochemiczne charakteryzujące cząsteczkę PEI wyznaczono na podstawie pomiarów PCS współczynnika dyfuzji (promienia hydrodynamicznego) oraz ruchliwości mikroelektroforetycznej. Przykładową zależność zredukowanego potencjału zeta warstwy PEI na micy od stopnia pokrycia przedstawiono na rysunku 1. Jak można zauważyć, wyniki eksperymentalne można w ilościowy sposób opisać opracowanym przez nas modelem teoretycznym, natomiast powszechnie stosowany dotychczas model Gouya-Champana okazał się nieadekwatny. Zgodność ta pozwoliła na wykazanie, że cząsteczki PEI zaadsorbowane na powierzchni miki zachowują kształt sferoidalny, taki, jak w głębi roztworu.

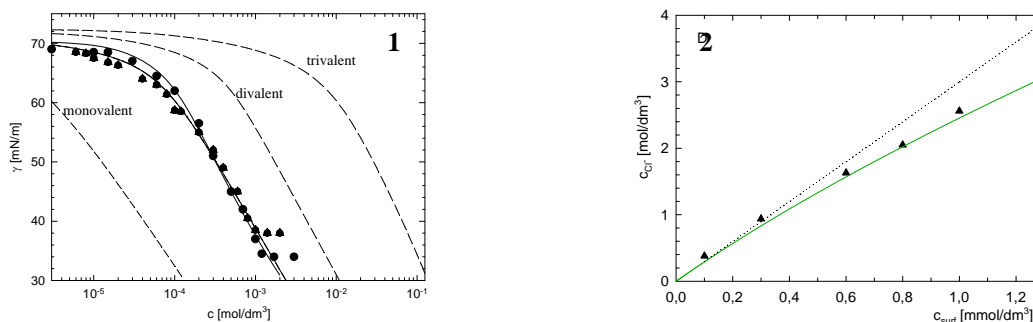
## 5.1. Adsorpcja surfaktantów jonowych na ciekłych powierzchniach

(doc. Piotr Warszyński, dr Grażyna Para, dr Ewelina Jarek, inż. Marzena Noworyta)

Zbadano eksperymentalnie i opisano teoretycznie wpływ wielowartościowych jonów na adsorpcję surfaktantów, w szczególności wpływ dwuwartościowych anionów siarczanowych  $\text{SO}_4^{2-}$  i jednowartościowych wodorosiarczanowych  $\text{HSO}_4^-$ , na napięcie powierzchniowe soli cetylotrójmetyloamoniowych ( $\text{C}_{16}\text{TABr}$  (CTABr) i  $\text{C}_{16}\text{TAHSO}_4$  (CTAHSO<sub>4</sub>)) oraz adsorpcję wielowartościowych soli dwu- i trój- amoniowych (dichlorek bis[2-hydroksy-3-(dodecyldimetyloamnio)propylo]alkiloaminy i trichlorek bis[2-hydroksy-3-(dodecyldimetyloamnio)propylo]dialkiloamoniowy. Dynamiczne i równowagowe napięcie powierzchniowe określano metodą analizy kształtu wiszącej kropli. Rozszerzono wcześniej opracowany model adsorpcji surfaktantów jonowych “quasi dwu-wymiarowego elektrolitu”(STDE) na adsorpcję jonów surfaktantu w obecności wielowartościowych jonów elektrolitu. Uzyskano teoretyczny opis wyników doświadczalnych zgodny z otrzymanymi izotermami napięć powierzchniowych. Wskazuje on, że jednowartościowe jony jak:  $\text{Br}^-$ ,  $\text{Cl}^-$  lub  $\text{HSO}_4^-$  efektywniej obniżają napięcie powierzchniowe badanego surfaktantu niż jony  $\text{SO}_4^{2-}$ , o ile porównujemy roztwory o tej samej sile jonowej. Można to wyjaśnić niską zdolnością dwuwartościowych jonów  $\text{SO}_4^{2-}$  do penetracji warstwy Sterna na skutek silnej hydratacji tych jonów.

W przypadku wielowartościowych soli amoniowych otrzymane izotermi adsorpcji wskazują na małą różnicę aktywności powierzchniowej pomiędzy solami bis i tris amoniowymi, tj. pomiędzy dwuwartościowymi i trójwartościowymi jonami surfaktantu (Rys. 1). Efekt ten został wyjaśniony tworzeniem asocjatyw wielowartościowy jon surfaktantu - przeciwjon. Wyliczone izotermi adsorpcji opisują dobrze wyniki eksperymentalne przy założeniu, że przy stężeniu surfaktantu w pobliżu c.m.c., występuje 10-20% asocjatu  $\text{Surf}^{2+}\text{Cl}^-$  w roztworze soli diamoniowej i ok. 50% asocjatu  $\text{Surf}^{3+}\text{Cl}^-$  oraz 10% asocjatu  $\text{Surf}^{3+}\text{Cl}_2^-$  w roztworze soli triamoniowej (Rys.1). Dla niższych stężeń surfaktantu ilość asocjatyw w roztworze maleje i przy stężeniu surfaktantu poniżej  $10^{-5}$  M są obecne tylko jego w pełni zdysocjowane jony.

Stopień asocjacji konieczny do wyjaśnienia małej różnicy aktywności powierzchniowej pomiędzy solami bis and tris amoniowymi jest zgodny ilościowo z wynikami pomiarów stężenia wolnych anionów chlorkowych w roztworze surfaktantu (Rys. 2).



Rys. 1. Eksperymentalne izotermi adsorpcji (bisAmC<sub>12</sub>)C<sub>2</sub> (trójkąty) i (trisAmbisC<sub>12</sub>)bisC<sub>2</sub> (kółka) opisane za pomocą modelu teoretycznego, przy założeniu tworzenia asocjatyw wielowartościowy jon surfaktantu – przeciwjon. Na rysunku zaprezentowano również izotermi teoretyczne wyliczone dla hipotetycznego jednowartościowego, dwuwartościowego i trójwartościowego surfaktantu o tej samej strukturze cząsteczki.

Rys. 2. Stężenie jonów chlorkowych w roztworze (trisAmbisC<sub>12</sub>)bisC<sub>6</sub> jako funkcja stężenia surfaktantu; symbole oznaczają dane eksperymentalne, linie kropkowane – stężenia jonów chlorkowych dla całkowicie zdysocjowanego surfaktantu, linie ciągłe – stężenia jonów chlorkowych wyliczone z prawa działania mas przy założeniu tworzenia asocjatyw jony surfaktantu jony chlorkowe.

### 5.3. Elektroaktywne cienkie warstwy polimerowe z wbudowanymi nanostrukturami węglowymi

(doc. dr hab. Piotr Warszński, mgr Jerzy Superata)

Kolejny etap zadania badawczego, realizowany w 2007 roku poświęcony był głównie wytwarzaniu na włóknach metalicznych szeregu powierzchniowych struktur hybrydowych o charakterze biomimetycznym, a następnie porównawczych badaniach ich właściwości elektrochemicznych pod kątem ich przyszłych zastosowań do budowy bio- lub chemsensorów.

Złożone warstwy powierzchniowe były budowane przy zastosowaniu chemicznych, elektrochemicznych i fizycznych technik modyfikacji powierzchni. Opracowano również innowacyjną procedurę, zapewniającą wygodną, systematyczną pracę z mikroelektrodami oraz ich przechowywanie.

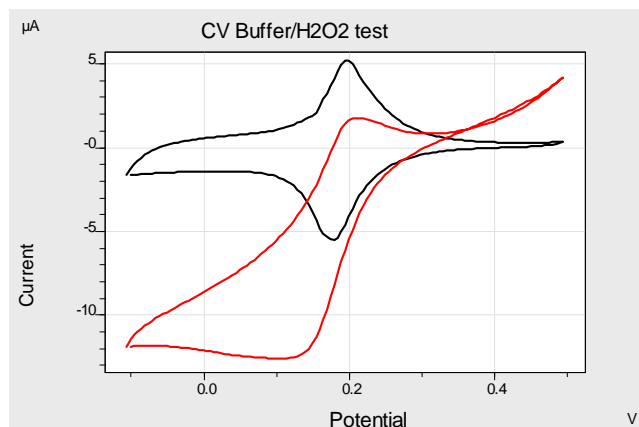
W celu wytworzenia mikroelektrod o pożądanymi właściwościami sensorycznymi, powierzchnie cienkich, metalicznych substratów zmodyfikowano stosując różne kombinacje fizykochemicznych metod osadzania, otrzymując szereg wariantów warstw powierzchniowych różniących się budową i właściwościami. Następnie przeprowadzono porównawcze badania otrzymanych mikroelektrod techniką CV, sprawdzając występowanie efektu elektrokatalitycznego wobec nadtlenu wodoru. Zbadano następujące struktury powierzchniowe:

- warstwy kompozytowe zawierające nanocząstki lub nanorurki węglowe w osnowie polimerów wytworzonych in-situ (polianilina, pochodne poliindolowe, polifenylendiamina, polietylenodiotyofen),
- warstwy powierzchniowe zawierające uporządkowane nanowłókna węglowe.

Wszystkie struktury były modyfikowane nanocząstkami błękitu pruskiego.

W kolejnej serii doświadczeń, na powierzchni szeregu mikroelektrod wytworzono hybrydowe multiwarstwy techniką naprzemiennego osadzania przeciwnie naładowanych cząstek (LbL). Do budowy multiwarstw użyto nanocząstek błękitu pruskiego oraz polielektrolitów: poliwinylpirydyny, chitosanu lub chlorku poli(diallilodimetyloamoniowego).

Porównanie właściwości elektrokatalitycznych wobec nadtlenu wodoru mikroelektrod wytworzonych różnymi metodami wykazało duże zróżnicowanie w zależności od składu komponentów oraz sposobu preparatyki. Rysunek ilustruje przykładowe voltamperogramy otrzymane dla układu elektroda platynowa modyfikowana multiwarstwami chitosanu i błękitu pruskiego w buforze fosforanowym dla pH 7.2 (czarne) i w tym samym buforze w obecności 2 mM H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (czerwone). Wskazują one na możliwość stosowanie tego typu struktur w sensorach nadtlenu wodoru.





## **6. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury**





## 6.1. Określenie zagrożeń drewna w budowlach zabytkowych na skutek infiltracji wody opadowej

(doc. Roman Kozłowski, dr Łukasz Bratasz, dr Sławomir Jakiela)

Mechanizmem niszczącym zabytkowe budowle drewniane wystawione na oddziaływania atmosferyczne jest wzrost grzybów niszczących drewno po przekroczeniu krytycznych poziomów zawartości wilgoci potrzebnej do ich życia. Założono, że opady i temperatura są dominującymi czynnikami klimatycznymi warunkującymi wzrost grzybów i że zależność pomiędzy szybkością tego wzrostu a temperaturą jest liniowa powyżej dolnej granicy wynoszącej 2°C. Opracowano ostateczną postać wskaźnika zagrożenia uwzględniającego rzeczywistą głębokość penetracji wody i wynikającą z niej rzeczywistą objętość drewna zaatakowanego przez grzyby. Transport wody przez 3 gatunki drewna – dąb, świerk i jodłę – szeroko używane w przeszłości w Europie przez budowniczych i artystów, został zmierzony przy zastosowaniu obrazowania Magnetycznym Rezonansem Jądrowym. Określono profil zawartości wilgoci w drewnie w funkcji czasu opadu zwilżającego zewnętrzną powierzchnię elementu drewnianego. Zastosowano model dwu-stopniowej infiltracji, który uwzględnia bardzo szybki transport wody przez naczynia kapilarne połączone z jej wolniejszą infiltracją do gęstszej struktury drewna otaczającej kapilary. Model ten pozwolił na numeryczną symulację profilu penetracji wody do drewna dla dowolnego epizodu opadów deszczu. W oparciu o modele wzrostu grzybów dostępne w literaturze przyjęto 20%, jako krytyczną zawartość wilgoci, powyżej której zaczyna się wzrost. Ponadto założono, że ponowne zapoczątkowanie wzrostu po okresie niskiej wilgotności następuje po 48 godzinach od wystąpienia wysokiej wilgotności sprzyjającej wzrostowi. Po uwzględnieniu obydwu warunków, profile penetracji wody do drewna, wywołane określonymi epizodami opadów, mogły zostać przeliczone na profile “okresów zagrożenia wzrostem grzybów”. Profile odpowiadające poszczególnym epizodom zostały połączone w kwartalne profile “czasu zagrożenia wzrostem grzybów”, ponieważ dane klimatyczne były dostępne w podziale na kwartały. Stąd końcowy wzór Wskaźnika Zagrożenia Drewna przez Klimat ( $CRI_{CH}^Q$ ) przyjął następującą postać:

$$CRI_{CH}^Q = (T_Q - 2) \int_0^{D_{\max}} t_{Qcrit}(D) \sigma(D) dD$$

gdzie:  $T_Q$  jest średnią kwartalną temperaturą powietrza w °C,  $t_{Qcrit}(D)$  jest czasem zagrożenia wzrostem grzybów w procencie  $\sigma(D)$  przekroju drewna w odległości  $D$  od powierzchni drewna,  $D_{\max}$  jest maksymalną odległością, dla której infiltracja wody daje zawartości wilgoci powyżej wielkości krytycznej;  $D_{\max}$  jest charakterystyczna dla każdego gatunku drewna i określa się ją doświadczalnie.



## **PROJEKTY BADAWCZE WŁASNE**



# 1. Wpływ położenia metalu przejściowego w strukturze heteropolizwiązku na jego aktywność katalityczną i na mechanizm reakcji utleniania węglowodorów cyklicznych

Projekt badawczy 3 T09A 092 29 [2005-2009]

(kierownik projektu: dr inż. Katarzyna Pamin)

Wprowadzenie metalu przejściowego do struktury heteropolikwasów wpływa na ich właściwości utleniające. Heteropolikwasy modyfikowane metalami przejściowymi znane są jako efektywne katalizatory reakcji utleniania. Dzięki swojej wielofunkcyjności, polegającej na łączeniu właściwości kwasowych z właściwościami redokсовymi, mogą być one wykorzystywane w reakcjach wieloetapowych takich jak utlenianie słabo reaktywnych organicznych związków.

Nanoszenie heteropolizwiązków na nośniki, takich jak polisacharydy, prowadzi do powstania układów samoorganizujących się. Właściwości takiego układu katalitycznego będą wypadkową zarówno właściwości heteropolikwasu jak i nośnika. Jako nośnik został wybrany chitosan, kationowy polisacharyd zawierający na powierzchni grupy aminowe.

Heteropolizwiązki charakteryzujące się dużą mocą kwasową nanoszono na powierzchnię chitosanu tworząc aktywne katalityczne układy. Celem tych badań była synteza kwasów  $H_3PW_{12}O_{40}$  i  $H_3PMo_{12}O_{40}$  i soli kobaltowych  $Co_3(PW_{12}O_{40})_2$ ,  $HCoPW_{12}O_{40}$ ,  $H_2Co_{0.5}PW_{12}O_{40}$ ,  $Co_3(PMo_{12}O_{40})_2$ ,  $HCoPMo_{12}O_{40}$ ,  $H_2Co_{0.5}PMo_{12}O_{40}$  naniesionych na chitosan oraz określenie ich właściwości katalitycznych w reakcji utleniania cyklooktanu. Aktywność katalityczna otrzymanych układów katalitycznych została porównana z aktywnością nienaniesionych heteropolizwiązków w badanej reakcji. Utlenianie cyklooktanu w fazie ciekłej było prowadzone w temperaturze  $120^\circ C$  przez 6 godzin i pod ciśnieniem 10 atm. Produktami reakcji są cyklookoktanol i cyklooktanon. W obecności chitosanu jako nośnika reakcja nie zachodzi. Aktywność katalityczna kwasu fofsorowolframowego wzrasta po naniesieniu na chitosan, natomiast w przypadku  $H_3PW_{12}O_{40}$ /chitosan praktycznie nie ulega zmianie. Z kolei aktywności soli kobaltowych w reakcji utleniania po związaniu z nośnikiem znacznie się obniżają.

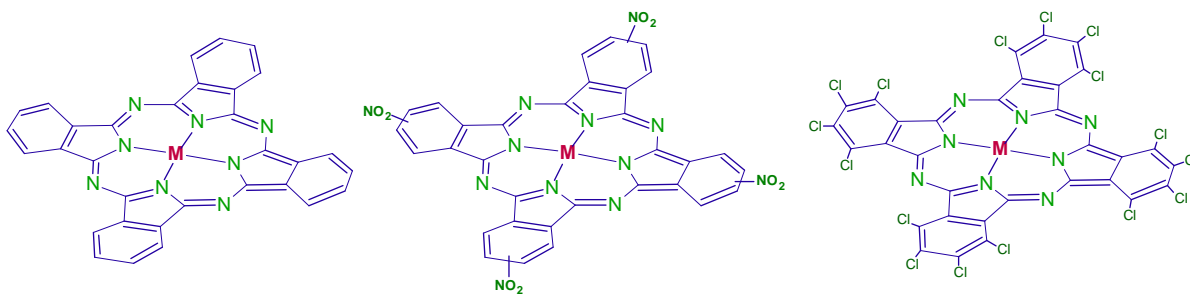
## 2. Zastosowanie makrocyclicznych kompleksów metali przejściowych: metaloporfiryn, metaloftalocyjanin i metalosalenów do katalitycznego utleniania propylenu

Projekt badawczy 3 T09B 091 29 [2005-2008]

(kierownik projektu: dr Jan Połtowicz)

Makrocycliczne kompleksy metali przejściowych: metaloporfiryny, metaloftalocyjaniny i metalosaleny są znane jako efektywne i selektywne katalizatory reakcji epoksydacji olefin w fazie ciekłej. Proces epoksydacji propylenu do tlenku propylenu w łagodnych warunkach tlenem molekularnym w obecności aldehydu jako koreduktora i przy zastosowaniu metaloporfiryn jako katalizatorów był od wielu lat badany w naszym Instytucie. Tlenek propylenu jest ważnym półproduktem przemysłu chemicznego i produktem wyjściowym do otrzymywania np. glikolu polipropylenowego czy eterów poliglikolowych służących do produkcji poliuretanów. Zapotrzebowanie na tlenek propylenu nieustannie wzrasta jednocześnie ze wzrostem jego ceny. W Polsce tlenek propylenu nie jest jeszcze produkowany. Obecnie stosowane w świecie metody charakteryzują się stosunkowo niską wydajnością do tlenku propylenu i obecnością niepożądanych produktów. Zaostrzające się przepisy ochrony środowiska stanowią dodatkowy bodziec do poszukiwania nowych, tanich i bezodpadowych technologii wytwarzania użytecznych produktów.

W prezentowanej pracy podjęto badania nad utlenianiem propylenu w obecności kompleksów ftalocyjaninowych metali przejściowych. Właściwości katalityczne tych metalokompleksów można łatwo modyfikować poprzez zmianę centrum aktywnego, jak i poprzez wprowadzenie podstawników elektronoakceptorowych do pierścienia. Reakcje epoksydacji propylenu prowadzono w temperaturze pokojowej tlenem molekularnym w obecności aldehydu izobutyłowego jako reduktora. Głównym produktem reakcji był tlenek propylenu. Jako katalizatory użyto trzech rodzajów metaloftalocyjanin (Rys. 1): prostych



Rys. 1. Struktury badanych katalizatorów

kompleksów MnPc, FePc, CoPc, NiPc, CuPc; kompleksów z grupami nitrowymi MnPc(NO<sub>2</sub>)<sub>4</sub>, CoPc(NO<sub>2</sub>)<sub>4</sub>, FePc(NO<sub>2</sub>)<sub>4</sub>; kompleks z podstawnikami chlorkowymi FePcCl<sub>16</sub> oraz kompleks z podstawnikami fluorowymi CoPcF<sub>16</sub>.

Wszystkie badane makrocycliczne metalokompleksy użyte jako katalizatory okazały się aktywne w badanym procesie, a ich aktywność zależy od rodzaju centrum aktywnego, oraz ilości i rodzaju podstawników wprowadzonych do pierścienia ftalocyjaninowego. Wśród prostych ftalocyjanin najlepszym katalizatorem był kompleks CoPc. Otrzymano następujący szereg aktywności: CoPc > MnPc > FePc > NiPc > CuPc. Wśród wszystkich katalizatorów z podstawnikami najbardziej aktywna była ftalocyjanina CoPcF<sub>16</sub>. Różnice w aktywności katalitycznej ftalocyjanin są prawdopodobnie związane z różnym mechanizmem aktywacji tlenu cząsteczkowego.

### 3. Mezoporowate nośniki krzemionkowe jako narzędzie do sterowania procesami katalizowanymi przez makrocykliczne metalokompleksy

Projekt badawczy 3 T09B 066 26 [2004-2007]

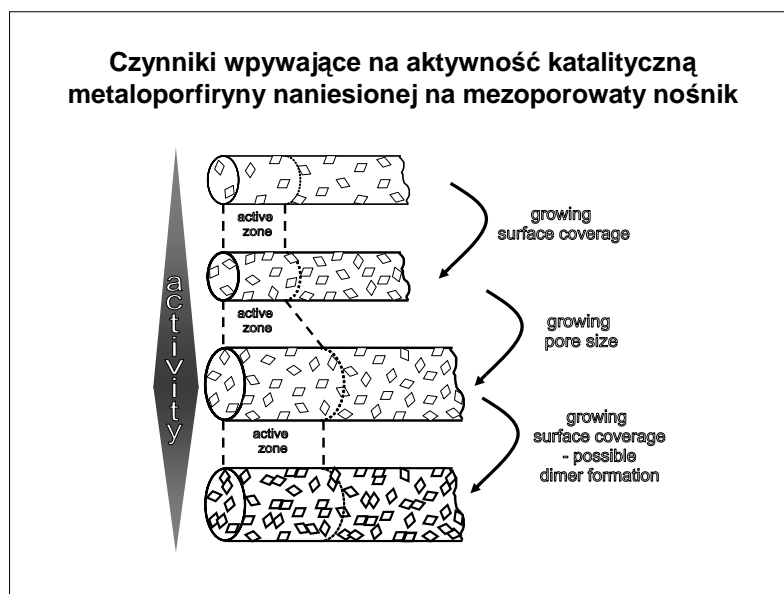
(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

W kwietniu 2007 roku zakończono realizację projektu, którego celem było opracowanie naukowych podstaw wytwarzania katalizatorów będących hybrydami aktywnych katalitycznie makrocyklicznych związków metaloorganicznych i mezoporowatych matryc krzemionkowych nowej generacji w taki sposób, by kontrolować selektywność procesu katalitycznego. W charakterze nośników stosowano układy typu HMS, MCM-41, FSM-16 i SBA-15, które dotowano glinem, w celu wygenerowania właściwości jonowymiennych. Na nich osadzano kationowe metaloporfiryny typu MTMPyP i MTAPP (M=Mn, Co lub Fe) stosując metodę wymiany jonowej. Reakcjami testowymi były: utlenianie cykloheksenu jodozobenzenem oraz utlenianie cyklooktanu tlenem molekularnym.

Najważniejsze wnioski płynące z realizacji grantu:

1. osadzenie metalokompleksu wewnątrz porów mezoporowatego nośnika zmienia rozkład produktów w badanych reakcjach w stosunku do procesu homogenicznego.
2. rozmiar efektu zależy od dystrybucji metalokompleksu w strukturze nośnika: im jest go więcej wewnątrz nanorurek (w odróżnieniu od zewnętrznej powierzchni ziaren nośnika) i im mniejsza ich średnica, tym silniejszy jest obserwowany efekt steryczny.
3. utlenianie cykloheksenu jodozobenzenem jest czułym testem pozwalającym na określenie rozkładu centrów Al w mezoporowatym nośniku krzemionkowym (pomiędzy wewnętrzną ścianką rurek a zewnętrzną powierzchnią ziaren nośnika).
4. przebieg niskotemperaturowych reakcji w fazie ciekłej na badanych katalizatorach wskazuje na występowanie ograniczeń dyfuzyjnych w obrębie porów nośnika.
5. aktywność katalizatorów na nośniku maleje, gdy stopień pokrycia metaloporfiryną jest na tyle duży, że mogą tworzyć się mniej aktywne dimery.
6. osadzenie na nośnikach typu mezoporowate krzemionki wydłuża czas życia badanych metalokompleksów.
7. Opracowano metody aluminowania pozwalające na kontrolę lokalizacji centrów Al.

W wyniku realizacji grantu opublikowano 4 publikacje.





#### **4. Określenie mechanizmów fizykochemicznych tworzenia wielowarstwowych nanomateriałów ceramicznych o podwyższonej biokompatybilności**

Projekt badawczy 3 T08D 045 29 [2005-2007]

(kierownik projektu: dr Barbara Jachimska)

Model syntezy nowej klasy materiałów implantacyjnych na bazie organicznej matrycy, w którą wbudowuje się bioaktywne nanocząstki ceramicznych jest modelem zbliżonym do naturalnie tworzonej struktury kości. Matryca organiczna spełnia różnorodną funkcję: zapewnia odpowiednią strukturę tworzonego kompozytu, przyspiesza proces mineralizacji, umożliwia wbudowywanie zarówno biocząstek, jak i protein. Aby taki model zaprogramować przebadano zarówno właściwości fizykochemiczne cząstek mineralnych oraz właściwości samych modyfikatorów organicznych oraz mechanizm rządzący tworzeniem wielowarstw. Badania te pozwalają na sterowanie procesem tworzenia danej struktury na poziomie molekularnym, a tym samym umożliwiają kontrolowanie końcowych właściwości syntezowanego materiału kompozytowego.

Skorelowania własności fizykochemiczne cząstek ceramicznych oraz matrycy organicznej na właściwości tworzonego materiału kompozytowego oraz jego strukturę, daje istotny postępem w dziedzinie inżynierii materiałowej.

Konstrukcji reometru kapilarnego oraz opracowanie metodyki pomiaru właściwości reologicznych zarówno suspensji ceramicznych jak i modyfikatorów organicznych (polielektrolitów) pozwala badać właściwości reologicznych suspensji, dla których konwencjonalne metody oparte na reometrze rotacyjnym są mało dokładne.

Przeprowadzone symulacje przy zastosowaniu dynamika molekularna pozwoliły na wyznaczenie wielu parametrów o podstawowym znaczeniu dla charakterystyki polielektrolitów oraz opisu ich adsorpcji na powierzchniach granicznych, takich jak grubość łańcucha, efektywna długość makrocząsteczki, jej kształt oraz efektywny stopień jonizacji. Dzięki badaniom fizykochemicznych własności polielektrolitów takich jak współczynnik dyfuzji, potencjał zeta oraz lepkości dynamicznej w zależności od pH oraz siły jonowej roztworu wyznaczono konformacje łańcucha polielektrolitowego w roztworze. Uzyskano szereg interesujących wyników, między innymi określono zależność efektywnego stopnia jonizacji cząsteczki oraz jej kształtu od pH i siły jonowej. Parametry te umożliwiają regulację kształtu cząsteczki od bardzo wydłużonego (dla niskich sił jonowych) aż do kształtu kulistego (dla wysokich sił jonowych). W ten sposób, przez zmianę pH i siły jonowej, możliwe będzie wytwarzanie warstw polielektrolitowych o regulowanej precyzyjnie grubości oraz strukturze.

Główną innowacją tego projektu jest zastosowanie matrycy organicznej w postaci samoorganizujących się multiwarstw polielektrolitów. Przeprowadzone badania pozwolą na opracowanie nowej generacji materiałów kompozytowych dla medycyny o kontrolowanych parametrach. Zaproponowany model jest zgodny z najnowszą strategią kontrolowania procesów technologicznych począwszy od badania własności w skali molekularnej.

## 5. Struktura i aktywność enzymatyczna syntazy kwasu klawaminowego: teoretyczne badanie mechanizmu reakcji katalitycznej

Projekt badawczy 2 P04A 042 26 [2004-2007]

(kierownik projektu: prof. Ewa Broclawik)

Projekt dotyczył zbadania molekularnego mechanizmu biosyntezy kwasu klawaminowego katalizowanej przez trójfunkcyjny enzym - syntazę kwasu klawaminowego. Białko to jest jednym z najlepiej przebadanych przedstawicieli z grupy niehemowych enzymów zależnych od  $\alpha$ -ketoglutaranu. Syntaza kwasu klawaminowego katalizuje syntezę kwasu klawulanowego, który jest ważnym z punktu widzenia farmakologicznego inhibitorem  $\beta$ -laktamaz. Wiele aspektów mechanizmu molekularnego reakcji katalizowanej przez syntazę kwasu klawaminowego pozostawało, jak dotąd, niewyjaśnionych, a jego poznanie umożliwiłoby zaprojektowanie nowych biokatalizatorów syntezujących nowe antybiotyki  $\beta$ -laktamowe. Na te ostatnie istnieje ogromne zapotrzebowanie we współczesnej medycynie ze względu na pojawiające się coraz częściej szczepy bakterii odpornych na większość znanych obecnie antybiotyków.

W projekcie wykonano wielokierunkowe badania obejmujące:

- badanie właściwości żelazowych centrów aktywnych w monooksygenazach i ich reakcji katalitycznych, zarówno dla analogicznych do syntazy klawaminowej centrów niehemowych, jak i żelazowych centrów hemowych;
- metodologiczne badania nad strukturą centrów żelazowych, których dokładne rozpoznanie wymagało zastosowania zaawansowanych metod chemii kwantowej oraz nowatorskiej metody uwzględniania otoczenia (proteina plus cząsteczki wody) w modelowaniu;
- zaproponowanie nowych elementów pełnego opisu mechanizmu reakcji katalitycznej syntazy kwasu klawaminowego, nie rozpatrywanych dotychczas w literaturze przedmiotu.

Celem wszystkich wymienionych prac było poznanie molekularnego mechanizmu katalizy enzymatycznej syntazy kwasu klawaminowego. Cel ten został w pełni osiągnięty. Wyniki uzyskane w trakcie realizacji projektu powinny pomóc w racjonalnym projektowaniu mutantów syntazy kwasu klawaminowego o pożądanych właściwościach katalitycznych i potencjalnym zastosowaniu przemysłowym w biosyntezie nowych związków (antybiotyków)  $\beta$ -laktamowych.

## 6. Dynamiczne struktury adsorpcyjne – wpływ substancji powierzchniowo aktywnej na zmiany ruchliwości powierzchni międzyfazowej

Projekt badawczy 3 T09A 164 27 [2004-2007]  
(kierownik projektu: prof. Kazimierz Malysa)

W wyniku przeprowadzonych badań zaproponowano mechanizm i określono najistotniejsze parametry decydujące o powstawaniu dynamicznej struktury warstwy adsorpcyjnej powodującej unieruchomienie powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz. Wykazano, że w wyniku powstania dynamicznej struktury warstwy adsorpcyjnej, tj. stacjonarnego nierównomiernego rozkładu zaadsorbowanych cząsteczek substancji powierzchniowo aktywnych na powierzchni poruszającego się pęcherzyka, opór hydrodynamiczny dla jego ruchu wzrasta, wskutek czego prędkość pęcherzyka zostaje drastycznie zmniejszona. Wykonano pomiary zmian prędkości lokalnych pęcherzyków oraz ich deformacji w funkcji odległości od punktu wytworzenia pęcherzyków, dla różnych stężeń roztworów badanych substancji powierzchniowo aktywnych (SPA). Wyznaczono także wpływ stężenia SPA na wielkość powstających na kapilarze pęcherzyków. Pomiary wykonano dla trzech przedstawicieli szeregu homologicznego bromków n-alkilotrójmetyloamoniowych (C8, C12 i C16); pięciu substancji powierzchniowo aktywnych o różnych grupach funkcyjnych a zawierających w swojej cząsteczce ośmiowęgowy łańcuch wodorowęglowy (kwas n-oktylowy w 0.001M HCl, n-oktylo- $\beta$ -D-glukopiranozyd, tlenek n-oktylofosfiny,

n-oktanol i n-oktylosiarczan sodowy) oraz protein Lysozyme i Bovine Serum Albumine (BSA w różnych warunkach pH 4.8 i 5.9). Wyznaczono również wpływ stężenia badanych SPA na prędkości maksymalne i graniczne baniek. Prędkość graniczna baniek, która w wodzie destylowanej wynosiła  $34.7 \pm 0.3$  cm/s zmniejszała się drastycznie w obecności badanych SPA i przy wysokich ich stężeniach wynosiła 15 cm/s.

Dla każdego z badanych związków można było wyznaczyć graniczne stężenie, powyżej którego nie obserwowano już wpływu zwiększania stężenia na wartości prędkości granicznych pęcherzyka gazowego. Prędkości graniczne dalej maleją, ale jest to już następstwo zmniejszania się rozmiaru bańki, związanego ze zmianą napięcia powierzchniowego (prawo Tate), a nie zmianą ruchliwości granicy międzyfazowej gaz/ciecz. Wyznaczono krytyczne stężenia roztworu, powyżej którego nie obserwuje się już tak drastycznego wpływu obecności surfaktanta na prędkość graniczną bańki. Są to stężenia zapewniające pokrycia adsorpcyjne rzędu 3% w kwasie n-oktylowym, 4% w n-oktylo- $\beta$ -D-glukopiranozdie, 3% w tlenku n-oktylodwumetylofosfiny, 2% w n-oktanolu, 5% w bromku cetylotrójmetyloamoniowym, 9% w bromku n-dodecylotrójmetyloamoniowym, 25% w bromku n-oktylotrójmetyloamoniowym oraz 32% w n-oktylosiarczanie sodowym. Do osiągnięcia podobne efektu w przypadku protein pokrycia adsorpcyjne wynosiły około 5% dla BSA i aż 98% dla Lysozyme. Stwierdzono, że zmianom w profilach prędkości baniek ściśle odpowiadają zmiany deformacji ich kształtu. Największa deformacja baniek rzędu 50% była obserwowana w wodzie destylowanej. Stopień deformacji kształtu bańki zmniejszał się ze stężeniem roztworów badanych SPA i przy ich dużych stężeniach wynosił tylko  $\chi < 1.03-1.05$ , gdzie  $\chi$  jest stosunkiem średnic poziomej i pionowej bańki.

## 7. Membrany na bazie zeolitów typu MFI, FAU i BEA jako nowe nanomateriały dla procesów rozdzielania mieszanin węglowodorów

Projekt badawczy 3 T09A 029 29 [2005-2008]  
(kierownik projektu: doc. Mirosław Derewiński)

Ze względu na unikatowe właściwości kształtoselektywne zeolitów, ich wysoką stabilność termiczną oraz znaczną odporność chemiczną, cienkie filmy zeolitowe (membrany), stały się w ostatnich latach przedmiotem intensywnych badań. Szeroki zakres możliwych zastosowań membran obejmuje m.in., rozdział mieszanin związków chemicznych na poziomie molekularnym, produkcję sensorów, zastosowania w procesach katalitycznych oraz przy produkcji nowych urządzeń optycznych. Ze względu na wielkość mikroporów (kanałów), których rozmiary są zbliżone do średnicy kinetycznej cząsteczek wielu ważnych – ze względu na praktyczne zastosowania – związków chemicznych, szczególnie dużą uwagę poświęcono preparatyce membran utworzonym przez cienkie, ciągłe warstwy kryształów zeolitów typu MFI (silikalit-1, ZSM-5).

Podstawową metodą stosowaną przy produkcji membran na bazie zeolitu MFI jest metoda tzw. wtórnego wzrostu (*secondary growth method*). W metodzie tej, w pierwszym etapie, na powierzchnię stałego, porowatego nośnika nanoszona jest warstwa nanokryształów zeolitu. Ich dalszy wzrost w warunkach hydrotermalnych z silnie rozcieńczonego żelu prowadzi do powstania cienkiej warstwy utworzonej przez przerastające się kryształy. Celem badań prowadzonych w okresie sprawozdawczym była preparatyka filmów typu MFI metodą wtórnego wzrostu na powierzchni stałych nośników, a także określenie wpływu parametrów syntezy na jakość powstającej membrany, jej strukturę oraz orientację kryształów w warstwie filmu.

Prowadząc kontrolowany wzrost nanokryształów silikalitu-1 (o wielkości rzędu 100 nm) osadzonych na powierzchni porowatych dysków  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  otrzymano cienkie filmy zeolitowe typu MFI, o grubości 2-5 nm, zbudowane z kryształów o różnym module krzemowym ( $\text{Si}/\text{Al} = 30\div 70$ ). Morfologię otrzymanych filmów określono metodą SEM. Rozkład Si i Al w warstwie zdefiniowano na podstawie analizy EDX przekrojów membran, natomiast orientację kryształów zeolitu tworzących warstwę membrany określono na podstawie analizy XRD. Otrzymane filmy posiadają tzw. kolumnową strukturę powstałą w wyniku przerastania się kryształów MFI oraz – zależnie od parametrów syntezy – posiadają różną orientację kryształów tworzących membranę. Membrany otrzymane po krótszych czasach syntezy wykazują głównie orientację [h0h] natomiast wydłużenie czasu syntezy prowadzi do otrzymania filmu o orientacji [00l] kryształów w warstwie powierzchniowej. Badania wpływu temperatury hydrotermalnej syntezy membran wykazały, że niższe temperatury procesu hydrotermalnego sprzyjają orientacji [h0h] kryształów, niezależnie od czasu formowania się filmu (w przedziale od 12 do 24 godz.). Wzrost temperatury wtórnego wzrostu nanokryształów prowadzi do zmiany orientacji i wyeksponowania płaszczyzny {00l} kryształów MFI. Przeprowadzono również syntezy membran typu MFI na wirujących dyskach  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Analiza strukturalna otrzymanych filmów wykazała, że zmiana sposobu prowadzenia syntezy (z warunków stacjonarnych na dynamiczne) nie prowadzi do istotnych zmian w orientacji kryształów zeolitu. Opracowano procedurę kalcynacji otrzymanych membran. W celu określenia ich jakości (ciągłość warstwy, brak defektów punktowych i pęknięć) przeprowadzono badania przepuszczalności badając przepływ pojedynczych gazów ( $\text{H}_2$  oraz  $\text{CO}_2$ ) oraz określono tzw. selektywność idealną (I.S.) membrany względem tych gazów. Membrany o najwyższych wartościach I.S. zostaną zastosowane do rozdzielania mieszaniny węglowodorów (n-/i-butan).

## 8. Badania efektywności aktywacji wodorowej naniesionych katalizatorów na osnowie nanocząstek złota

Projekt badawczy 1 T09A 094 30 [2006-2009]

(kierownik projektu: dr Erwin Lalik)

Projekt dotyczy badania wpływu wprowadzania niewielkich ilości argonu na proces aktywacji wodorowej naniesionych katalizatorów na osnowie nanocząstek złota w reakcji niskotemperaturowego utleniania CO do CO<sub>2</sub>. W roku 2007 wykonano (1) testy katalityczne w reakcji utleniania CO na katalizatorach typu Au/TiO<sub>2</sub>+SiO<sub>2</sub>; (2) otrzymano katalizatory zawierające nanocząstki Au osadzone na spinelach chromowych zawierających kobalt, cynk i magnez; (3) połączono spektrometr masowy z mikrokalorymetrem przepływowym i wykonano reakcje testowe na takim zestawie.

(1) Wykonano pomiary wpływu traktowania katalizatora w strumieniu Ar w odpowiedniej sekwencji z H<sub>2</sub>, na aktywność katalityczną układów (A) 1%Au/75%TiO<sub>2</sub>25%SiO<sub>2</sub> oraz (B) 1%Au/50%TiO<sub>2</sub>50%SiO<sub>2</sub> w reakcji utleniania CO. Nie udało się otrzymać wystarczająco aktywnego materiału o składzie 1%Au/25%TiO<sub>2</sub>75%SiO<sub>2</sub>. Wyniki aktywności katalitycznej dla próbki świeżej oraz po aktywacji wodorowej z udziałem Ar zestawiono w Tabeli 1. Materiał (A) wykazuje wyraźny efekt wzmaganie efektywności aktywacji wodorowej na skutek kontaktu z argonem. Wykonano także eksperyment polegający na pomiarze aktywności katalizatora traktowanego dwukrotnie w atmosferze H<sub>2</sub>, jednakże bez obecności Ar pomiędzy dwoma aktywacjami w H<sub>2</sub>. W tym przypadku, konwersja CO dla próbki po procesie dwukrotnej aktywacji w H<sub>2</sub> była jednakowa i wynosiła ~13%. A zatem, można wykluczyć, że na aktywność wpływa czas traktowania w H<sub>2</sub>, lub sekwencja gazów H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>. Wzrost aktywności katalizatora należy przypisać obecności Ar pomiędzy kolejnymi aktywacjami w H<sub>2</sub>. Powyższe eksperymenty wykonano dwukrotnie, za każdym razem uzyskując te same (w granicach błędu, ~0.5%) wartości aktywności.

Tabela 1. Wpływ atmosfery H<sub>2</sub> i Ar na aktywność próbek (A) i (B) w utlenianiu CO

| Stan katalizatora   | Konwersja CO [%] na katalizatorze (A)        | Konwersja CO [%] na katalizatorze (B)        |
|---|--|--|
|   | 1%Au/75%TiO <sub>2</sub> 25%SiO <sub>2</sub> | 1%Au/50%TiO <sub>2</sub> 50%SiO <sub>2</sub> |
| świeża próbka   | 7.9  | 1.6  |
| po traktowaniu w strumieniu H <sub>2</sub> w 150°C przez 30 minut                                       | 12.6   | 7.4  |
| po traktowaniu w strumieniu Ar (50°C, 5 minut) i ponownym traktowaniu w H <sub>2</sub> (150°C, 30minut) | 27.3   | 6.7  |

(2) Tabela 2 przedstawia wyniki testów zestawu mikrokalorymetr-spektrometr masowy w reakcji utleniania H<sub>2</sub> w mieszaninie H<sub>2</sub> i syntetycznego powietrza (20%O<sub>2</sub>+80%N<sub>2</sub>) o różnym składzie dla dwóch prędkości przepływu mieszaniny. Celem testu było ustalenie zgodności stopnia zużycia tlenu, mierzonego przy pomocy spektrometru masowego, z ilością wydzielanego ciepła mierzonego kalorymetrycznie,. Tabela 2 pokazuje, że zmierzony efekt cieplny reakcji utleniania H<sub>2</sub> wykazuje doskonałą zgodność z ilością ciepła zliczoną dla tej reakcji jako ułamek ciepła, które wydzieliliby się przy całkowitej konwersji podawanego tlenu przyjmując ciepło tworzenia wody 500 kJ/mol O<sub>2</sub>.

Tabela 2. Ciepło utlenianie H<sub>2</sub> porównane do zużycia tlenu.

| Zawartość H <sub>2</sub> w synt. powietrzu | Przeptyw 1cm <sup>3</sup> /min |              | Przeptyw 2cm <sup>3</sup> /min |              |
|--|--------------------------------|--------------|--------------------------------|--------------|
|  | Zużycie tlenu                  | ilość ciepła | Zużycie tlenu                  | ilość ciepła |
| 25%  | 0.61                           | 0.66         | 0.51                           | 0.51         |
| 50%  | 0.66                           | 0.71         | 0.56                           | 0.54         |
| 75%  | 0.63                           | 1.3          | 0.92                           | 1.1          |

## 9. Mechanizmy tworzenia multiwarstw o kontrolowanej architekturze na powierzchniach metalicznych

Projekt badawczy 1 T09A 123 30 [2006-2009]  
(kierownik projektu: dr Lilianna Szyk-Warszyńska)

Niniejszy projekt badawczy ma na celu poznanie mechanizmów i rozwinięcie ilościowego opisu zjawisk wielowarstwowej adsorpcji polielektrolitów, cząstek koloidalnych i mikrokapsulek na powierzchniach heterogenicznych w warunkach działania pól sił hydrodynamicznych i sił zewnętrznych.

W ramach projektu zostały do tej pory przeprowadzone następujące prace badawcze:

- Modyfikacja multiwarstwami polielektrolitów powierzchni miki i krzemu metodą sekwencyjnej adsorpcji polikationów i polianionów na powierzchniach makroskopowych. Główną siłą napędową procesu sekwencyjnej adsorpcji są oddziaływania elektrostatyczne, a nałożenie kolejnej warstwy jest możliwe dzięki nieskompensowanemu, przeciwnemu ładunkowi na powierzchni poprzedniej warstwy. Jako modelowe polielektrolity zostały zastosowane: poli(4-styrenosulfonian)sodu (PSS), chlorowodorek poli(alliloaminy) (PAH) oraz PAH znaczone fluorescencyjnie, polietyleno imina (PEI). Roztwory polielektrolitów były przygotowywane w wodnym roztworze 0.015 M, 0.15 M i 1.5 M NaCl i pH=4, z którego zachodziła adsorpcja polielektrolitów na powierzchniach miki i krzemu. Stężenia polielektrolitów wynosiły 10ppm, 100ppm i 500ppm. Warstwy były nakładane w kolejności (PAH/PSS)<sub>n</sub>PAH\*; PEI(PSS/PAH)<sub>n</sub>PSS/PAH\*; (PAH\*/PSS)<sub>n</sub> oraz PEI(PSS/PAH\*)<sub>n</sub>, gdzie PAH\* oznacza chlorowodorek poli(alliloaminy) znaczone fluorescencyjnie, n ilość warstw podwójnych PAH/PSS. Przy użyciu mikroskopu fluorescencyjnego zostały zbadane struktury nałożonych warstw polimerowych, ich heterogeniczność w zależności od ilości naniesionych warstw polielektrolitowych. Okazało się, że wraz ze wzrostem ilości nałożonych warstw polielektrolitowych ich struktury stają się coraz bardziej homogeniczne. W przypadku multiwarstw zaczynających się od PEI następuje szybsze osiągnięcie stopnia homogeniczności.
- Przy pomocy elipsometrii zostały pomierzone grubości warstw polielektrolitowych. Z przeprowadzonych pomiarów wynika, że im wyższa siła jonowa roztworu polielektrolitu i im wyższe stężenie polielektrolitu tym grubsze warstwy budowane są na powierzchniach adsorpcyjnych.
- Aby zbadać grubości warstw polielektrolitowych na powierzchniach stali szlifowanej i nieszlifowanej, za pomocą mikroskopu fluorescencyjnego mierzono intensywności fluorescencji tychże warstw w zależności od ich ilości. Intensywności były porównywane z intensywnościami warstw polielektrolitowych naniesionych na płytkach krzemowych i stąd wyznaczana była grubość warstw polielektrolitów zaadsorbowanych na stali. Taką metodę porównawczą zastosowano ze względu na fakt, że nie ma możliwości bezpośredniego pomiaru grubości warstw polielektrolitów zaadsorbowanych na stali metodą elipsometryczną. Wyniki pokazały podobną zależność grubości warstw zaadsorbowanych jak w przypadku krzemu i dodatkowo okazało się, że chropowatość podkładki w znaczącym stopniu wpływa na grubości warstw adsorpcyjnych (im większa chropowatość powierzchni tym grubsze warstwy adsorpcyjne).

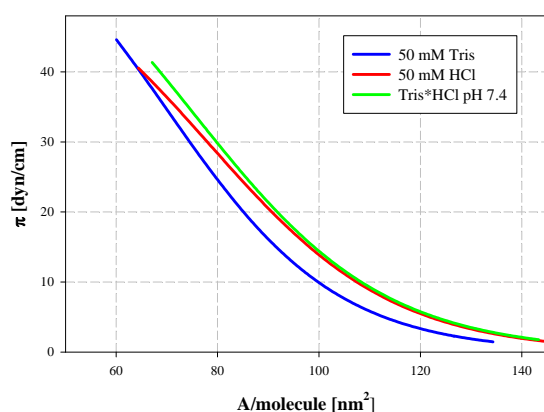
## 10. Wpływ kadmu i selenu na własności powierzchniowe modelowych warstw lipidowych preparowanych na bazie naturalnych błon komórkowych

Projekt badawczy 1 T09A 122 30 [2006-2009]  
(kierownik: dr hab. Maria Zembala)

Celem badań zaplanowanych w ramach grantu jest określenie zmian własności warstw galaktolipidów pochodzących z chloroplastów pszenicy spowodowanych kontaktem z jonami kadmu i selenu. Kadm uważany jest za jeden z bardziej toksycznych czynników powodujących znaczne uszkodzenia tkanek roślinnych, zmniejszenie plonów, inhibicję fotosyntezy, redukcję zawartości chlorofilu w liściach jak i zaburzenia relacji wodnych i pobierania składników odżywczych z gleby. Z kolei jony Se mogą hamować toksyczne efekty wywołane innymi metalami.

Materiałem badawczym są galaktolipidy: mono- (MGDG) i di-galaktozydylodiacylglicerol (DGDG), związane z dwoma nasyconymi i/lub nienasyconymi kwasami tłuszczowymi występujące w chloroplastach. Ten szczególny skład lipidowy błon chloroplastów wyróżnia je spośród innych błon i prawdopodobnie odgrywa istotną rolę w ich funkcjonowaniu. Istotną część pracy stanowi hodowla komórkowa (w kontrolowanych warunkach), izolacja, oczyszczanie i określenie składu chemicznego galaktolipidów uzyskanych z chloroplastów pszenicy.

Równoległe do gromadzenia materiału pochodzenia naturalnego, na komercyjnych próbkach galaktolipidów określono własności monowarstw MGDG nanoszonych na wadze Langmuir'a na wodne roztwory buforu Tris o pH=7.3 i 10 i HCl i stałej sile jonowej = 50 mM. Wobec bardzo słabej zależności izoterm ciśnienia powierzchniowego od pH w dalszych



badaniach stosowano bufor o pH=7.3. Opracowano metodę nanoszenia monowarstw MGDG na stałą podkładkę w postaci miki modyfikowanej w różny sposób. Najtrwalsze warstwy uzyskiwano dla miki modyfikowanej chemi-sorbowanym kationowym silanem (APTES). Potencjał zeta podkładki z naniesioną warstwą MGDG był wyznaczany drogą pomiaru potencjału przepływu przy wykorzystaniu tego samego buforu (Tris) jako elektrolitu.

Niestety, wyniki uzyskane w taki sposób charakteryzowały się dużym rozrzutem, który, jak to wykazano w dalszych pomiarach pochodził głównie z rozrzutu wartości potencjałów zeta dla samej modyfikowanej miki. Dlatego w dalszych badaniach spróbujemy nanosić 3 warstwy lipidu, aby lepiej ekranować pole elektryczne podkładki. Wstępne określenie charakterystyki materiału odniesienia, jakim są warstwy czystych lipidów jest bardzo istotne dla późniejszych badań wpływu jonów na ich własności.

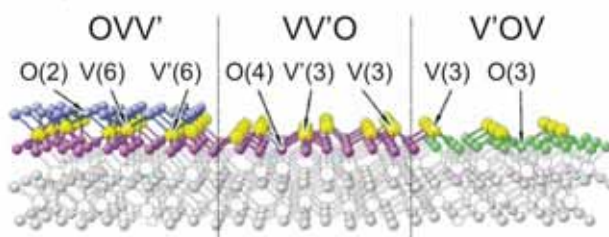
## 11. Teoretyczne badania heterogeniczności powierzchni katalizatorów na bazie tlenków wanadu.

Projekt badawczy N204 024 31/0475 [2006-2008]  
(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)

Katalizatory na bazie pięciotlenku wanadu znajdują szerokie zastosowanie w wielu procesach przemysłowych (stanowiących rozmaite chemicznie reakcje) z uwagi na dużą różnorodność centrów aktywnych (metalicznych i tlenowych) obecnych zarówno na powierzchni wysyczonej koordynacyjnie (010) jak i na powierzchniach niewysyconych (001) oraz (100). Dodatkowym źródłem aktywności katalitycznej tych układów jest redukcja centrów V w czasie przebiegu reakcji prowadząca do powstawania niższych tlenków ( $V_2O_5 \rightarrow VO_2 \rightarrow V_2O_3$ ) oraz możliwość wprowadzenia do układów innych pierwiastków, np. fosforu. Periodyczne obliczenia stabilności termodynamicznej różnych powierzchni  $V_2O_5$  pokazały, że procentowy udział płaszczyzn o charakterze niewysyconym wynosi około 15% w całej morfologii kryształu. Dlatego niniejszy raport obejmuje badanie struktury elektronowej nisko-indeksowych powierzchni  $V_2O_5$  oraz struktury elektronowej różnych ścieg powierzchni (0001) $V_2O_3$ .

Obliczenia przeprowadzono metodą DFT, z funkcjonalem korelacyjno wymiennym RPBE oraz lokalnym LDA dla wstępnej optymalizacji geometrii przy analizie różnych ścieg powierzchni (0001)  $V_2O_3$ , w przybliżeniu klasterowym programem StoBe. Analizowano rozkład ładunków na atomach (analiza Mullikena), rzędy wiązań (analiza Mayera) oraz całkowitą i parcjalaną atomową gęstość stanów walencyjnych (DOS i pDOS).

Z obliczeń wynika, iż powierzchnie nisko-indeksowe (010), (001) oraz (100) wykazują podobną strukturę elektronową z wiązaniami V-O o charakterze jonowo-kowalencyjnym. Ładunki na powierzchniowych centrach tlenowych skalują się wraz ze wzrostem liczby koordynacyjnej centrów, podczas gdy ładunki atomowe centrów metalicznych są niższe dla niewysyconych koordynacyjnie powierzchni (001) i (100) w porównaniu z wysyconą powierzchnią (010). Widma gęstości stanów wykazują duże podobieństwa zarówno w strukturze stanów walencyjnych jak i w paśmie przewodnictwa. We wszystkich trzech przypadkach powierzchni nisko-indeksowych centrami elektrono-akceptorowymi są kationy wanadu, podczas gdy centra o charakterze zasad Lewisa to centra tlenowe O(2), O<sup>e</sup>(2) i O(3). Analiza energii stabilizacji różnych ścieg powierzchniowych (0001) $V_2O_3$  wskazuje na ścieg typu V'OV jako termodynamicznie uprzywilejowane (Rys.1). Wszystkie wiązania V-O mają charakter kowalencyjno-jonowy. Analiza populacyjna pokazuje, iż charakter nukleofilowy powierzchniowych centrów tlenowych zwiększa się ze wzrostem ich liczby koordynacyjnej: O(1)<O(2)<O(3)<O(4). Rozkład ładunku w badanych układach indukuje silne pole elektrostatyczne pomiędzy poszczególnymi warstwami, co powoduje różny dla różnych ścieg, ale zawsze znaczny efekt relaksacyjny w warstwach przypowierzchniowych. Widma gęstości stanów w obszarze pasma przewodnictwa oraz położenie poziomu HOMO wewnątrz tego pasma sugerują, iż powierzchnie badanych układów są podatne zarówno na atak elektrofilowy jak i nukleofilowy, stanowią więc układy donorowo-akceptorowe.



Rys. 1. Różne ściegi atomowe powierzchni (0001)  $V_2O_3$



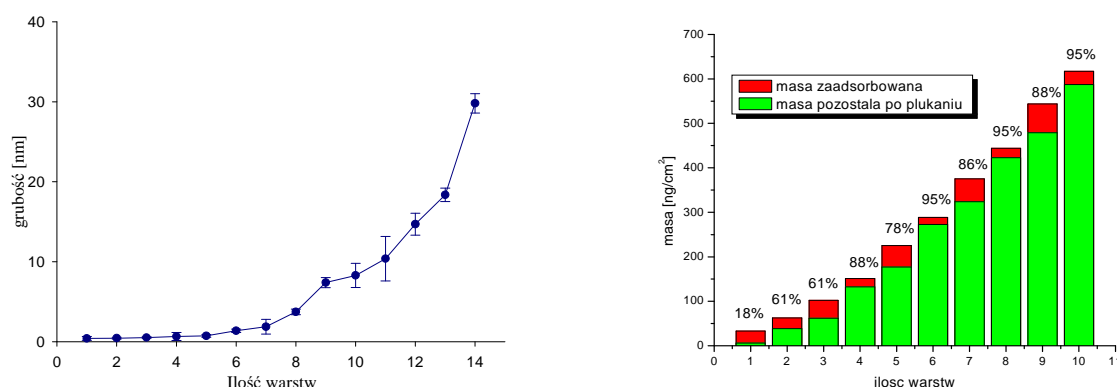
## 12. Struktura, własności powierzchniowe i przepuszczalność wielowarstwowych filmów polielektrolitów dla zastosowań w modyfikacji powierzchni i enkapsulacji substancji chemicznych

Projekt badawczy N204 166 31/3734 [2006-2009]

(kierownik projektu: doc. Piotr Warszński)

Procesy enkapsulacji i kontrolowanego uwalniania substancji chemicznych stanowią podstawę wielu współczesnych technologii stosowanych w przemyśle farmaceutycznym, kosmetycznym, środków ochrony roślin a nawet poligraficznym. Procesy kontrolowanego uwalniania substancji aktywnych uwieczonych w nano- i mikrokapsułkach są coraz szerzej stosowane w technologiach biomedycznych.. Jedną z najbardziej obiecujących technik wytwarzania powłok mikrokapsułek jest sekwencyjna adsorpcja polielektrolitów (PE) z roztworów wodnych, zwana też techniką Layer-by-Layer (LbL).

Celem prac wykonywanych w ramach projektu było określenie wpływu rodzaju polielektrolitów oraz warunków ich osadzania na strukturę, stabilność i przepuszczalność wielowarstwowych filmów polielektrolitowych (multiwarstw) otrzymywanych metodą LbL. W szczególności określono wpływ pH na filmy utworzone ze słabych polielektrolitów PAH/PAA. Wielowarstwowe filmy tworzone w warunkach, gdy oba polielektrolity były silnie naładowane (PAH – pH 3, PAA – pH 11), słabo naładowane (PAH – pH 11, PAA – pH 3), oraz w warunkach mieszanych (PAH, PAA – pH 3), (PAH, PAA – pH 11). Filmy polielektrolitowe osadzano techniką LbL na powierzchniach wafli krzemowych Si/SiO<sub>2</sub>. Ze względu na niski ładunek powierzchni krzemowych w warunkach kwaśnych (p.z.c. krzemionki dla pH 3-3.5), pierwsze cztery warstwy filmów polielektrolitowych były osadzane zawsze przy pH 7. Pomiar grubości filmów został wykonany techniką elipsometryczną natomiast masę osadzonych warstw PE wyznaczono przy użyciu mikrowagi kwarcowej (współpraca z Instytutem Maxa-Plancka w Poczdamie). Przykładowe zestawienie wyników pomiarów grubości i masy zaadsorbowanych filmów (PAH/PAA) zostało zaprezentowane na wykresie.



Rys. 1. Porównanie grubości i masy wielowarstwowych filmów (PAH/PAA) zaadsorbowanych na powierzchni płytek Si/SiO<sub>2</sub> przy pH=7 dla warstw 1-4 i pH=3 dla warstw >4

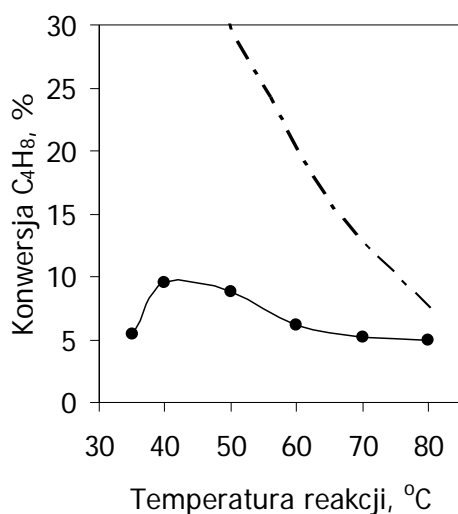
Stwierdzono, że najgrubsze warstwy uzyskano w warunkach, gdy oba polielektrolity były słabo naładowane a najcieńsze, gdy filmy tworzone w warunkach maksymalnego ładunku PAH i PAA. Jednocześnie grube filmy charakteryzują się dużą niejednorodnością i małą trwałością (potwierdzoną poprzez nieregularne oscylacje grubości filmów). Wskazuje to na tworzenie się kompleksów polielektrolitów o wymiarach kilkudziesięciu nanometrów, które są słabo związane z filmem.

### 13. Heteropolikwasy jako katalizatory w reakcji syntezy eteru etylo-*tert*-butylowego (ETBE) w fazie gazowej.

Projekt badawczy N204 164 31/3689 [2006-2009]

(kierownik projektu: dr inż. Anna Micek-Ilnicka)

Eter etylo-*tert*-butylowy (ETBE) jest obecnie powszechnie stosowany jako dodatek przeciwstukowy do benzyn samochodowych. Otrzymuje się go w wyniku syntezy etanolu i izobutenu w obecności kwaśnych katalizatorów. W ramach badań objętych tematyką grantu przeprowadzono syntezę ETBE w fazie gazowej, w układzie niezawierającym wody. Jako katalizator stosowano bezwodny heteropolikwas typu Wellsa-Dawsona  $H_6P_2W_{18}O_{62}$  oraz etanol absolutny. W reaktorze różniczkowym wykonano cykl badań kinetycznych. Zmierzono



szybkości syntezy eteru w 40°C, w układzie etanol-izobuten, przy różnych ciśnieniach reagentów. W temperaturze 40°C układ znajdował się daleko od stanu chemicznej równowagi.

Fig. 1. Przebieg konwersji izobutenu w zależności od temperatury reakcji (krzywa przerywana odpowiada konwersji równowagowej)

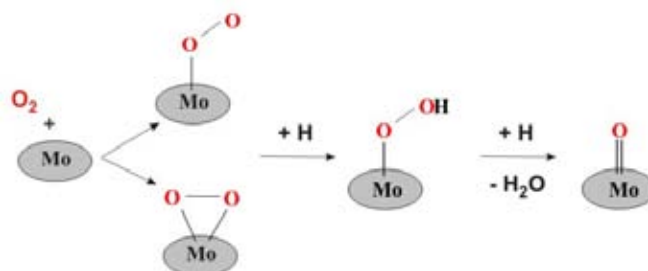
Na podstawie pomiarów wyznaczono rzędy reakcji w stosunku do izobutenu (1.6) i etanolu (-2.0). Nietypową, ujemną wartość rzędu reakcji w stosunku do etanolu, czyli jego inhibitujący wpływ na szybkość tworzenia eteru, wyjaśniono w oparciu o przyjęty mechanizm reakcji. Mechanizm syntezy ETBE oparto o doświadczalne wyniki sorpcji reagentów, które wykazały, że polarny etanol wnika do wnętrza krystalitów heteropolikwasu, natomiast niepolarna olefina pozostaje na powierzchni katalizatora tworząc oligomery. Zarówno etanol jak i izobuten wiążą protony pochodzące od heteropolikwasu, tworząc jony etoksoniowe w objętości katalizatora jak i zoligomeryzowane karbokationy na jego powierzchni. Reakcja syntezy ETBE zachodzi na powierzchni heteropolikwasu pomiędzy karbokationem a etanolem dostarczanym z objętości krystalitów. W oparciu o założony mechanizm sformułowano matematyczny model badanej reakcji. Model ten pozwala przewidzieć powstawanie w układzie merów etanolu, których stopień metryzacji można wyliczyć z równania kinetycznego. Przy założeniu, że procesem limitującym szybkość reakcji jest powstawanie karbokationu i porównując równanie empiryczne z równaniem teoretycznym stwierdzono, że dominującą formą etanolu w warstwie przypowierzchniowej jest dimer  $(C_2H_5OH)_2H^+$ . Zakładając, że reakcją limitującą szybkość jest tworzenie ETBE, otrzymano jako dominującą formę etanolu trimery  $(C_2H_5OH)_3H^+$ . Istnienie zarówno dimerów, jak i trimerów jest prawdopodobne, fakt ten potwierdzają wyniki sorpcji etanolu.

## 14. Teoretyczny opis aktywacji tlenu i reaktywności różnych centrów tlenowych w hetero- i homogenicznych molibdenowych układach katalitycznych

Projekt badawczy N204 034 31/0795 [2006-2008]  
(kierownik projektu: dr Renata Tokarz-Sobieraj)

Tlen molekularny (stabilna paramagnetyczna molekula), który pełni fundamentalną rolę w procesach selektywnego utleniania wielu związków organicznych wymaga wstępnej aktywacji, która może zachodzić poprzez związanie  $O_2$  z centrum metalicznym obecnym zarówno w kompleksie przejściowym (kataliza homogeniczna) jak i na powierzchni ciała stałego (kataliza heterogeniczna). Różnorodność zarówno zaadsorbowanych, jak i przekształconych form tlenu zależy w znacznym stopniu od charakteru/typu jonu centralnego (stopnia utlenienia, koordynacji) jak również od charakteru otaczających go ligandów (w kompleksie) czy atomów sąsiadujących (na powierzchni ciała stałego).

Sprawozdawana część pracy dotyczy kwantowo-chemicznego modelowania procesu adsorpcji i aktywacji cząsteczki  $O_2$  na metaloporfirynie molibdenowej MoPCl (P=pierścień tetrapirolowy, Cl=ligand aksjalny) i w układzie tlenku molibdenu  $MoO_3$ , jako modeli odpowiednio homo- i heterogenicznych układów katalitycznych. Schemat obliczeń przedstawiony na Rys.1, obejmuje adsorpcję  $O_2$  w różnych geometriach i jego dalszą transformację (poprzez tworzenie różnych tlenowo i tlenowo-wodorowych ugrupowań powierzchniowych) do formy oxo. Struktury badanych układów charakteryzowano za parametrów geometrycznych (długości wiązań, kąty) elektronowych (analiza populacyjna Mullikena, analiza rzędów wiązań Mayera) oraz energii poszczególnych etapów procesu.



Rys. 1. Schemat adsorpcji i transformacji  $O_2$  do formy oxo

Wyznaczona w obliczeniach energia wiązania tlenu wskazuje, że zaadsorbowana cząsteczka może adsorbować się zarówno na kompleksie jak i na powierzchni ciała stałego w różnych geometriach, ale energetycznie uprzywilejowana jest forma side-on (dwa wiązania Mo-O). Konsekwencją związania tlenu molekularnego jest jego aktywacja polegająca na równoczesnym wydłużeniu (z  $1.2\text{\AA}$  do  $\sim 1.4\text{\AA}$ ) i osłabieniu wiązania O-O (rzęd wiązania zmienia się z 1.8 na  $\sim 1.0$ ). W większości przypadków (z wyjątkiem kompleksu porfiryny z  $Mo^{2+}$ ) adsorpcja wodoru na aktywowanej cząsteczce tlenu prowadzi do utworzenia grupy –OOH związanej z centrum metalicznym. Adsorpcja drugiego wodoru prowadzi do utworzenia cząsteczki wody, która może ulec desorpcji zarówno w układach kompleksowych, jak i z powierzchni ciała stałego. Powstała forma Mo=O oxo tlenu jest różna (ładunki, rzędy wiązań, energie wiązania) w obydwu układach, co może wpływać na charakter katalizowanych przez to ugrupowanie reakcji (głównie epoksydacja w katalizie homogenicznej i selektywne utlenianie w układach heterogenicznych).

## 15. Nowa metoda wytwarzania nośników nano- oraz mikrokapsularnych o określonej funkcjonalności do selektywnego dostarczania reagentów

Projekt badawczy N205 022 31/1112 [2007-2010]

(kierownik projektu: prof. Zbigniew Adamczyk)

Nanowarstwy powierzchniowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności stały się przedmiotem intensywnych badań naukowych w ostatnich latach ze względu na szeroki obszar potencjalnych zastosowań praktycznych, głównie w medycynie, przemyśle farmaceutycznym, spożywczym, kosmetycznym, elektronicznym, odlewnictwie precyzyjnym, a także technologiach związanych z ochroną środowiska naturalnego. Multiwarstwy polielektrolitów tworzone na powierzchniach szkieletów o rozmiarach koloidalnych pozwalają na wytwarzanie nano- lub mikrokapsulek, mających potencjalnie szeroki obszar zastosowań przemysłowych oraz biomedycznych. Pomimo istotnego znaczenia poznawczego i praktycznego, mechanizmy i kinetyka procesów tworzenia nanomateriałów warstwowych nie została dotychczas określona w dostatecznym stopniu. Tak więc, celem naukowym niniejszego projektu badawczego jest poznanie mechanizmów i rozwinięcie ilościowego opisu zjawisk wielowarstwowej adsorpcji polielektrolitów, prowadzących do wytwarzania mikrokapsulek. Pierwszym etapem badań, było przeprowadzenie obliczeń teoretycznych struktury wybranych polielektrolitów, będących podstawowym elementem budulcowym ścianek kapsulek w roztworach wodnych. Obliczenia te prowadzono przy pomocy metody dynamiki molekularnej, używając pakietu HYPERCHEM, a do opisu pola sił procedury AMBER. Rozpuszczalnik wodny traktowany był w sposób uproszczony, jako faza ciągła, charakteryzująca się określoną wartością stałej dielektrycznej, natomiast ruch jonów rozpatrywany był w sposób jawny (przy pomocy dynamiki Langevina). Przeprowadzone obliczenia pozwoliły na wyznaczenie wielu parametrów o podstawowym znaczeniu dla dynamiki polielektrolitów oraz ich adsorpcji na powierzchniach granicznych, takich jak grubość łańcucha, efektywną długość makrocząsteczki, jej kształt oraz efektywny stopień jonizacji. Obliczenia prowadzono dla polielektrolitów: chlorowodoru polialilaminy (PAH), o ciężarze cząsteczkowym 14 000 i charakterze kationowym oraz kwasu poliakrylowego (PAA), o charakterze amfoterycznym i ciężarze cząsteczkowym 12 000. Wykazano, że przez zmianę stopnia jonizacji można zmienić kształt cząsteczki od bardzo wydłużonego (dla niskich sił jonowych) aż do kształtu kulistego, dla wysokich sił jonowych. Drugim etapem ilościowego opisu tworzenia mono- i multiwarstw polielektrolitów były obliczenia prowadzone przy pomocy metody Monte Carlo – RSA (random sequential adsorption) struktury multiwarstw, w zależności od gęstości warstwy pierwszej oraz liczby warstw. Wyznaczono w ten sposób dwu- i trójwymiarową gęstość cząstek w funkcji współrzędnych przestrzennych, rozkład gęstości w obrębie poszczególnych warstw, funkcje korelacyjne rozkładu cząstek (dwu- i trójwymiarowe) oraz średnią grubość warstwy. Wykazano, że dla niskich pokryć warstwy pierwszej można uzyskać bardziej równomierny rozkład gęstości cząstek w obrębie całego filmu polielektrolitowego. W oparciu o te obliczenia został wyjaśniony również w sposób ilościowy mechanizm tzw. wykładniczego wzrostu multiwarstw polielektrolitów, interpretowany w literaturze w sposób jedynie jakościowy, jako efekt agregacji cząsteczek polielektrolitów.

## 16. Mechanizm działania katalizatorów "nano-Au/tlenek" w reakcjach utleniania CO

Projekt badawczy N204 089 32/2633 [2007-2010]

(kierownik projektu: prof. Józef Korecki)

Zadania na rok 2007 obejmowały:

### 1. Przygotowanie i charakteryzacja nośników i katalizatorów proszkowych i modelowych

Wykonano preparatykę proszkowych katalizatorów nano (nominalnie 1% wag. Au), stosując jako nośnik wyjściowy preparat handlowy  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  Cerac. Katalizatory przygotowane były dla określenia wpływu stopnia zdefektowania nośnika (różne stechiometria tlenku) na ich właściwości. W tym celu katalizatory poddane były prażeniu w różnych atmosferach (powietrze, argon) i przy różnych temperaturach. Stan katalizatorów był kontrolowany pomiarami XPS i spektroskopią mössbauerowską. Wykonano wstępne testy katalityczne reakcji utleniania CO na katalizatorach prażonych w temperaturach  $350^\circ\text{C}$  i  $450^\circ\text{C}$  w atmosferze powietrza i argonu i stwierdzono, że wysokiej konwersji CO sprzyja atmosfera beztlenowa oraz wyższa temperatura prażenia.

Przygotowano monokrystaliczne podłoża  $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  o różnej stechiometrii powierzchni, kontrolowanej sposobem preparatyki metodą reaktywnej epitaksji Fe na  $\text{MgO}(001)$ . Podłoża scharakteryzowano wykonując pomiary XPS. Wykonano serię modelowych katalizatorów  $\text{Au}/\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  i określono wpływ wielkości pokrycia Au i obróbki termicznej na widma fotoemisji.

### 2. Opracowanie metody pomiarów katalitycznych w reaktorze przyłączonym do aparatury ultrawysokiej próżni dla próbek proszkowych.

Skonstruowano układ pomiarowy pozwalający śledzić przebieg reakcji w wysokociśnieniowej komorze reakcyjnej przyłączonej do układu ultrawysokiej próżni. Układ zawiera kwadrupolowy spektrometr masowy oraz układ zaworów pozwalających próbować gazy reakcyjne na wylocie reaktora. Układ jest sterowany programem napisanym w środowisku LabView i pozwala na programowanie i kontrolę temperatury oraz zbieranie szesnastu sygnałów masowych. System z powodzeniem przetestowano na reakcji utleniania CO na katalizatorze  $\text{Au}/\text{FeO}_x$ .

## 17. Otrzymywanie mezoporowatych struktur typu SBA-15 o hierarchicznym systemie porów przy użyciu nanocząstek węgla lub lateksu jako szablonów strukturalnych

Projekt badawczy N204 166 32/4313 [2007-2009]

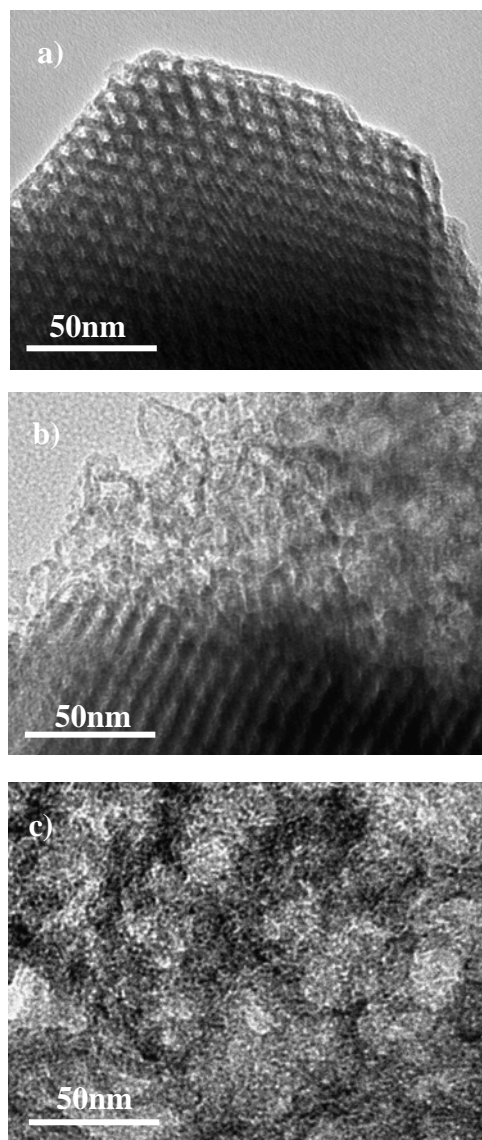
(kierownik projektu: dr Małgorzata Zimowska)

Dynamiczny rozwój nauki i techniki stwarza ogromne możliwości projektowania i syntezy materiałów o pożądanymi właściwościami chemicznymi i fizycznymi.

Materiały typu SBA-15, otrzymywane w szerokim zakresie temperatur od 35-130°C, przy użyciu tetraetylo-ortokrzemianu (TEOS-u) i trójblokowego kopolimeru Pluronic 123 (EO<sub>20</sub>-PO<sub>70</sub>-EO<sub>20</sub>) jako templat, posiadają uporządkowane, heksagonalnie upakowane, cylindryczne kanały. Charakteryzują się obecnością mezoporów, ale posiadają również mikropory występujące w ściankach krzemionkowych. Mikropory są wynikiem wzajemnego oddziaływania i penetracji prekursora krzemionkowego przez hydrofilowe łańcuchy EO (tlenku etylenu), które następnie ulegają okluzji w ściankach krzemionki.

Celem niniejszego projektu było opracowanie nowej metody otrzymywania mezoporowatych struktur typu SBA-15 o hierarchicznym systemie porów, przy użyciu nanocząstek węgla jako szablonów strukturalnych. W trakcie syntezy materiału SBA-15 do żelu syntezowego wprowadzono jako tzw. twardej templat, nanocząstki węgla „carbon black Pearl 2000”, który został usunięty podczas kalcynacji. Badaniom XRD, SEM, HRTEM oraz adsorpcji i desorpcji N<sub>2</sub> poddano materiały: SBA-15/s (SBA-15 otrzymany zgodnie ze standardową procedurą), SBA-15/CB (SBA-15 z dodatkiem węgla carbon black), SBA-15/2xCB (SBA-15 z dodatkiem dwukrotnej ilości węgla carbon black).

Badania HRTEM wykazały obecność dobrze uporządkowanej heksagonalnej struktury typu plastra miodu w materiale SBA-15/s (Rys. 1a). Odległość  $d_{100}$  oszacowana z obrazów HRTEM odpowiada danym XRD i wynosi ok. 80.0 Å. Średnia grubość ścianki wynosi ok. 38 Å, a średnica porów jest porównywalna z danymi z adsorpcji N<sub>2</sub> i wynosi 54 Å. Badania HRTEM materiału SBA-15/CB wykazały obecność obszarów o przestrzennym uporządkowaniu jednorodnych kanałów, jak w materiale SBA-15 oraz nieuporządkowane domeny powstałe na bazie szablonów węglowych zrosnięte z siecią SBA-15. (Rys. 1b). Zdjęcia HRTEM materiału SBA-15/2xCB wykazały obecność porowatej, nieuporządkowanej, amorficznej krzemionki, piano-podobnej, powstałej na templatce węglowej. (Rys. 1c).



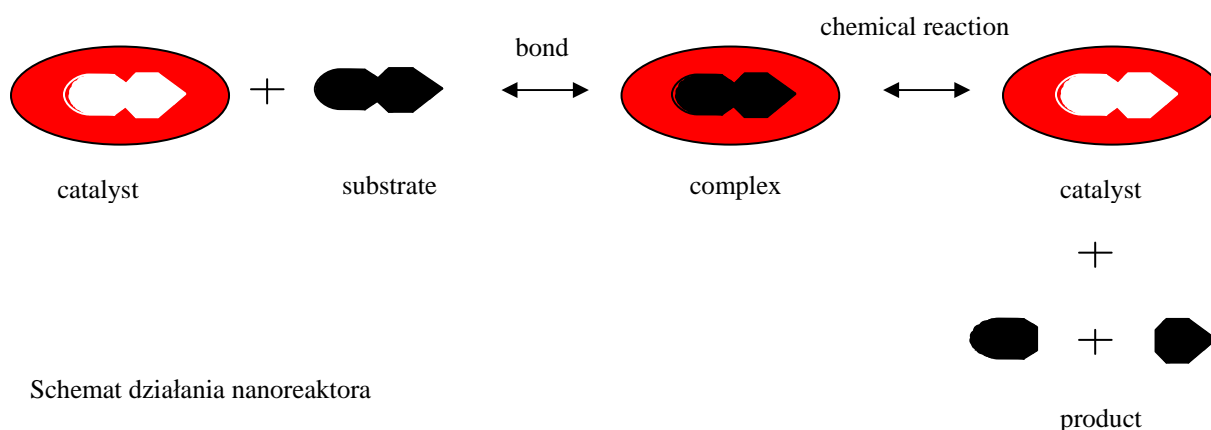
Rys. 1. Obrazy HRTEM a) SBA-15/s, b) SBA-15/CB, c) SBA-15/2xCB

## 18. Zastosowanie makrocyklicznych kompleksów metali przejściowych w samoorganizujących się układach do katalitycznych procesów utleniania węglowodorów

Projekt badawczy N 204 12232/3142 [2007-2010]

(kierownik projektu: doc. Ryszard Grabowski)

Metalokompleksy są znane jako aktywne i selektywne katalizatory procesów utleniania związków organicznych w łagodnych warunkach. Dobierając odpowiedni polielektrolit, surfaktant lub fosfolipid do reakcji i odpowiedni kompleks metali przejściowych otrzymujemy specyficzny rodzaj nano-reaktora. Właściwości tego nano-reaktora powodują, że reakcja niepolarnych substratów zachodzi w jego centrum, a hydrofilowe produkty utleniania są usuwane na zewnątrz. Taki układ reakcyjny jest układem przyjaznym dla środowiska naturalnego, ponieważ reakcja jest prowadzona w środowisku wodnym. Zastosowanie katalizy w samoorganizujących się układach, takich jak polisacharydy lub liposomy pozwala na proste i szybkie oddzielenie katalizatora od produktów, co powoduje zwiększenie wydajności i selektywności reakcji oraz zapobiega powstawaniu niepożądanych produktów ubocznych.



Celem tych badań była synteza i charakterystyka kompleksów metali, tj. metaloporfiryn, metaloftalocyjanin i heteropolizwiązków umieszczonych w samoorganizujących się układach takich jak polielektrolity. Jako matryce dla nanoreaktorów katalitycznych zastosowano polielektrolity: chitosan (Mw 390kDa) oraz algininę (Mw 100kDa). Wykonano pomiary potencjału zeta chitosanu oraz algininy w zależności od pH oraz siły jonowej badanych roztworów w celu określenia optymalnych warunków tworzenia kompleksów polimer-metalokompleks. Wyznaczono punkt izoelektryczny dla badanych polielektrolitów, który wynosi 8.0 lub 2.0 odpowiednio dla chitosanu lub algininy. Nanoszenie metalokompleksów na polielektrolity prowadzone było w optymalnych warunkach pH, które dla chitosanu jest w zakresie 3-6, natomiast dla algininy w zakresie 4-10. Z roztworów wodnych polielektrolitów stracono kompleksy szeregu układów polielektrolit-metalokompleks. W tym celu wykonano serię syntez takich układów dla metaloporfiryn: CoTPPS, MnTPPS, FeTPPS, metaloftalocyjanin: CoPcS, MnPcS, FePcS i heteropolizwiązków:  $H_3PW_{12}O_{40}$ ,  $H_3PMo_{12}O_{40}$ ,  $Co_3(PW_{12}O_{40})_2$ ,  $HCoPW_{12}O_{40}$ ,  $H_2Co_{0.5}PW_{12}O_{40}$ ,  $Co_3(PMo_{12}O_{40})_2$ ,  $HCoPMo_{12}O_{40}$ ,  $H_2Co_{0.5}PMo_{12}O_{40}$ .

Tak przygotowane stracone kompleksy polielektrolit-metalokompleks będą zastosowane w jako katalizatory reakcji utleniania węglowodorów.

## **19. Wpływ atomu centralnego (P, Si) oraz atomu addenda (W, Mo) w solach srebrowych heteropolikwasów o strukturze Keggina na bezpośredni rozkład tlenków azotu NO<sub>x</sub>**

Projekt badawczy N N204 1494 33 [2007-2010]

(kierownik projektu: dr Tadeusz Machej)

W ramach zadań badawczych przewidzianych do wykonania na rok 2007 określono zawartość wody krystalizacyjnej oraz wody solwatującej protony w heteropolikwasach: fosfowolframowym, fosfomolibdenowym, krzemowolframowym i krzemomolibdenowym. Następnie, opracowano preparatykę obojętnych soli srebrowych w/w heteropolikwasów z użyciem azotanu srebra. Stwierdzono, że warunki strącania soli takie jak: pH roztworu, mieszanie oraz temperatura wpływają na wielkość powierzchni właściwej badanych soli. Powierzchnię określano metodą BET. W otrzymanych solach ustalono także zawartość wody metodą termogravimetryczną. Okazało się, że np. w soli Ag<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> oprócz wody krystalizacyjnej istnieje również woda solwatująca jony srebrowe. Badano także trwałość w/w soli srebrowych metodą DSC w zakresie temperatur 20-1000°C. Najbardziej trwałą okazała się sól obojętna kwasu fosfowolframowego, wykazująca duży efekt egzotermiczny związany z jej rozkładem około 600°C. Przejścia fazowe w innych solach wymagają przeprowadzenia dodatkowych badań XRD w komorze wysokotemperaturowej. Rozpoczęto badania soli srebrowych metodą dyfrakcji rentgenowskiej i na ich podstawie podjęto próbę uściślenia ich struktur metodą Rietvelda. W przypadku soli Ag<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> stwierdzono, że jony srebrowe występują w tej soli w formie kationu Ag<sup>+</sup> lub w formie dimeru (Ag-Ag)<sup>+</sup>. To ważne spostrzeżenie będzie weryfikowane w następnym roku metodą spektroskopii XPS oraz podczas dodatkowego zadania badawczego. Powyższa sól będzie badana *in situ* przed i po redukcji wodorem przy użyciu XPS i XRD. Pozwoli to na określenie, która forma jonów srebra ulega redukcji wodorem. Jest prawdopodobne, że aktywność tej soli w reakcji rozkładu tlenków azotu wykazana w badaniach wstępnych jest związana z tą niezwykłą strukturą.





## **PROJEKTY BADAWCZE PROMOTORSKIE**



# 1. Porównanie właściwości katalitycznych metaloporfiryn i ich $\mu$ -oxo kompleksów w procesach utleniania węglowodorów

Projekt badawczy promotorski 3 T09A 167 29 [2005-2007]

(promotor: prof. J. Haber, doktorant: mgr E. Tabo)

Metaloporfiryny odgrywają istotną rolę jako katalizatory procesów biologicznych i chemicznych. Właściwości katalityczne metaloporfiryn zależą od rodzaju metalu centralnego, struktury pierścienia makrocyklicznego, a także obecności i rodzaju ligandu aksjalnego. Podstawniki znajdujące się w pierścieniu porfiryńowym wpływają na strukturę elektronową metaloporfiryny, która decyduje o aktywności katalitycznej w reakcjach przebiegających z przekazaniem ładunku.

Przeprowadzone zostały syntezy prostych metaloporfiryn manganu, żelaza i kobaltu, a także ich  $\mu$ -oxo kompleksów z podstawnikami elektronodonorowymi i elektronoakceptorowymi w pierścieniach fenyłowych. Wpływ podstawników elektronoakceptorowych (T(p-Cl)PP, T(p-CF<sub>3</sub>)PP, TPFPP) i elektronodonorowych (TMP, T(p-CH<sub>3</sub>)PP, T(p-OCH<sub>3</sub>)PP, TTP) na aktywność katalityczną prostych porfiryń i ich  $\mu$ -oxo kompleksów badano w reakcji utleniania cyklooktanu ditlenem w temperaturze 120 °C i pod ciśnieniem powietrza 10 atm.

W reakcjach katalizowanych przez metaloporfiryny znaczącą rolę odgrywa ligand aksjalny, szczególnie w pierwszym etapie reakcji utleniania. Wpływ ligandu aksjalnego na aktywność katalityczną metaloporfiryny określono dla *terakis*(toluilo) porfiryń żelaza lub kobaltu z różnymi ligandami aksjalnymi (F, Cl, CH<sub>3</sub>COO<sub>2</sub>, OH, Br) w reakcji utleniania cyklooktanu ditlenem.

Wszystkie otrzymane katalizatory metaloporfiryńowe, tzn. proste metaloporfiryny, jak i ich  $\mu$ -oxo kompleksy wykazują aktywność katalityczną w reakcji utleniania cyklooktanu tlenem molekularnym. Wprowadzenie do pierścieni fenyłowych podstawników elektronodonorowych, jak również elektronoakceptorowych zwiększa aktywność katalityczną metaloporfiryn w reakcji utleniania cyklooktanu tlenem molekularnym. Proste metaloporfiryny wykazują większą aktywność katalityczną w reakcji utleniania cyklooktanu niż ich  $\mu$ -oxo analogi. W trakcie reakcji katalitycznej  $\mu$ -oxo kompleksy rozpadają się na dwie proste metaloporfiryny. Jedna z powstałych metaloporfiryn posiada ligand aksjalny OH, a druga metaloporfiryna przechodzi w formę zredukowaną M(II)Por.

Aktywność katalityczna metaloporfiryn wzrasta wraz ze wzrostem elektroujemności grupy będącej ligandem aksjalnym. Potencjał redukcji metalu M(III)/M(II) w badanych metaloporfiryńach maleje wraz ze wzrostem elektroujemności podstawnika będącego ligandem aksjalnym. Ligand aksjalny zachowuje się jak donor elektronów do atomu centralnego, więc wpływa on na potencjał redukcji metalu. Ligand aksjalny rozpoczyna łańcuch reakcji utleniania przez odszczepienie atomu wodoru od utlenianej cząsteczki węglowodoru z wytworzeniem rodnika alkilowego i przekazaniem elektronu do atomu centralnego w porfiryńie. Proces ten zachodzi tym łatwiej im większą elektroujemność wykazuje ligand aksjalny.

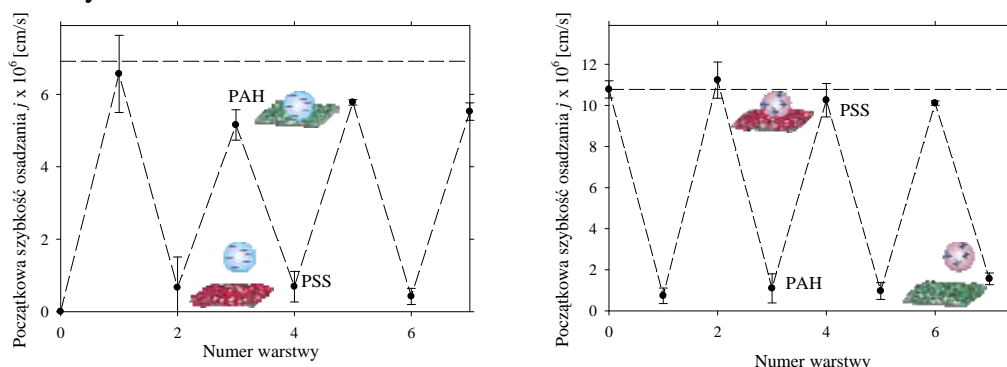
## 2. Mechanizm oddziaływania cząstek koloidalnych z powierzchniami heterogenicznymi wyznaczony przy pomocy badań adsorpcji oraz zjawisk elektrokinetycznych”

Projekt badawczy promotorski 3 T09A 145 29 [2005-2008]

(promotor: prof. Zbigniew Adamczyk, doktorant: mgr Aneta Michna)

Celem przeprowadzonych prac było rozwinięcie metodyki badawczej, umożliwiającej określenie struktury warstw heterogenicznych na podkładkach stałych wytwarzanych przez kontrolowane nanoszenie multiwarstw polielektrolitów na podstawie pomiarów kinetyki adsorpcji i struktury monowarstw cząstek koloidalnych na takich powierzchniach. Przeprowadzone badania dotyczyły pomiarów kinetyki osadzania cząstek koloidalnych o regulowanym potencjale powierzchniowym (dodatnim i ujemnym) na powierzchniach pokrytych multiwarstwami polielektrolitów. Zbadano wpływ czynników decydujących o właściwościach fizykochemicznych multiwarstw polielektrolitów, min.: wpływ siły jonowej, rodzaj użytego polielektrolitu oraz wpływ ciężaru cząsteczkowego pierwszej warstwy pełniącej funkcję prekursora.

Na rys. 1 zaprezentowano wyniki pomiarów początkowych szybkości osadzania  $j_0$  na multiwarstwach utworzonych przez sekwencyjną adsorpcję PAH i PSS, o ciężarach cząsteczkowych 70 kDa.



Rys.1 Zależność początkowej szybkości osadzania cząstek  $j_0$  od liczby warstw polielektrolitów zaadsorbowanych na mice: a) ujemny, b) dodatni lateks.

Na podstawie uzyskanych zależności stwierdzono, że osadzanie cząstek koloidalnych na multiwarstwach polielektrolitów jest ściśle skorelowane z ładunkiem warstwy zewnętrznej. W przypadku osadzania cząstek na przeciwnie naładowanych warstwach tj. ujemnego lateksu na PAH oraz dodatniego na PSS, otrzymano maksymalne początkowe szybkości osadzania, charakterystyczne dla bezbarierowej adsorpcji cząstek na powierzchniach homogenicznych. Osadzanie cząstek koloidalnych na multiwarstwach polielektrolitów tworzonych na warstwie prekursora tj. PEI o ciężarze cząsteczkowym 750 kDa, zostało wykorzystane do zbadania wpływu siły jonowej na strukturę tworzonej warstwy polimerowej. Wyniki doświadczeń wskazały silny wzrost początkowych szybkości osadzania wraz ze wzrostem siły jonowej roztworu, z którego następowała adsorpcja polielektrolitów. Efekt ten interpretowano wzrostem gęstości warstwy PEI, co zwiększało jej ładunek, a tym samym gęstość następnych warstw PSS i PAH. Badania wpływu PEI o różnym ciężarze cząsteczkowym równym 70 kDa i 750 kDa, na strukturę tworzonych filmów, wykazały znaczny wzrost początkowych strumieni cząstek w przypadku osadzania lateksów na warstwie polikationu o wyższym ciężarze cząsteczkowym, co można przypisać zwiększonej wartości ładunku. Stwierdzono, że obserwowany charakter zmian strumienia cząstek jest ściśle skorelowany z periodycznymi zmianami potencjałów zeta obserwowanych multiwarstw mierzonych przy użyciu metody potencjału przepływu zmianami kątów zwilżania na multiwarstwach polielektrolitów.

### 3. Mechanizm działania katalizatora rodowego do rozkładu tlenu diazotu w gazach emitowanych do środowiska

Projekt badawczy promotorski 3 T09D 010 28 [2005-2007]

(promotor: prof. Jerzy Haber, dorktorant: mgr inż. Małgorzata Nattich)

Celem poniższej rozprawy doktorskiej jest określenie zależności aktywności katalitycznej katalizatora rodowego w reakcji rozkładu podtlenu azotu ( $N_2O$ ) od struktury nanocząsteczek rodu jako centrów aktywnych, sposobu ich nanoszenia na powierzchnię nośnika, wpływu obecności jonów metali alkalicznych (pierwiastków grupy pierwszej układu okresowego lit, sód, potas, cez) jako domieszek nośnika  $\gamma-Al_2O_3$  oraz wpływu ich specjacji. Informacje o strukturze powierzchni katalizatora i jej właściwościach uzyskano wykorzystując badania spektroskopowe w podczerwieni (IR) zaadsorbowanych cząsteczek sond, elektronową mikroskopię transmisyjną (TEM) i elektronową mikroskopię skaningową (SEM), pomiar powierzchni właściwej metodą BET, oraz określenie dyspersji rodu przez miareczkowanie wodorem. Aktywność katalityczna wyznaczono poprzez pomiar konwersji i selektywności reakcji rozkładu podtlenu azotu jako funkcji temperatury, składu fazy gazowej i obciążenia katalizatora. Wykonano również pomiary adsorpcji wodoru i tlenu węgla.

Praca obejmowała następujące etapy:

- synteza katalizatorów przez osadzanie tlenu rodu oraz promotorów na nośniku  $\gamma-Al_2O_3$ ,
- określenie właściwości fizykochemicznych otrzymanych katalizatorów,
- badanie aktywności katalizatorów w reakcji rozkładu  $N_2O$ .

Przedstawiona praca pozwoliła na określenie parametrów preparatywnych decydujących o aktywności katalizatora rodowego w reakcji rozkładu podtlenu azotu oraz wyjaśnienia mechanizmu wpływu tych parametrów.

#### **4. Emisja akustyczna drewna w obiektach zabytkowych pod wpływem fluktuacji mikroklimatu**

Projekt badawczy promotorski 1 H01E 010 30 [2006-2007]

*(promotor: doc. Roman Kozłowski, doktorant: mgr Sławomir Jakiela)*

Systematyczne modelowanie numeryczne uszkodzeń mechanicznych drewna pod wpływem fluktuacji parametrów mikroklimatycznych w jego otoczeniu, pozwoliło na ilościowe określenie gradientów zawartości wilgoci w przekroju elementów drewnianych. Obliczenia przeprowadzone dla obiektu cylindrycznego, imitującego rzeźbę drewniana, poddanemu różnym zmianom temperatury powietrza i wilgotności względnej, odpowiadają rzeczywistym warunkom występującym w otoczeniu zabytków. Otrzymane wyniki pozwoliły na określenie progowych wielkości zmian parametrów otoczenia, po przekroczeniu których następuje uszkodzenie zabytków drewnianych. Maksymalne dopuszczalne zmiany wilgotności względnej, powodujące graniczne naprężenia elastyczne, zostały podane w funkcji amplitudy, okresu trwania i początkowego poziomu wilgotności względnej, od którego zaczyna się zmiana. W ten sposób można było określić obszary odwracalnej i nieodwracalnej odpowiedzi drewna, a także obszar zagrożenia całkowitym zniszczeniem mechanicznym.

Monitorowanie emisji akustycznej (EA) drewnianych cylindrów, poddawanych zmianom parametrów mikroklimatycznych w warunkach laboratoryjnych, pozwoliło na zobrazowanie mikropeknięć, które były następstwem pola naprężeń pojawiającego się w badanych próbkach. Rozkłady zarejestrowanych zdarzeń EA ukazały negatywny wpływ szybkich zmian mikroklimatu na drewno. Na drodze nieinwazyjnego monitorowania uszkodzeń potwierdzono dopuszczalne poziomy zmian wilgotności względnej, otrzymane wcześniej z modelowania numerycznego.

Zastosowanie techniki emisji akustycznej do monitorowania zabytkowych drewnianych organ w kościele w Olkuszu, w trakcie cykli grzewczych, okazało się przydatnym narzędziem do detekcji naprężeń powodujących uszkodzenia.

## **5. Nowe metody syntezy kryształów zeolitów typu MFI, FAU i BEA z multimodalnym systemem porów i ich wykorzystanie jako nowe nanomateriały dla procesów katalitycznych**

Projekt badawczy promotorki N204 162 31/3659 [2006-2008]

(promotor: doc. Mirosław Derewiński, doktorant: mgr Anita Burkat-Dulak)

Sita molekularne (zeolity) znalazły zastosowanie w wielu procesach przemysłu petrochemicznego, w tym w preparatyce katalizatorów bifunkcyjnych o właściwościach kwasowo-redoksowych. Otrzymywanie aktywnych katalizatorów tego typu na bazie zeolitów jest ograniczone ze względu na niewielkie rozmiary kanałów i/lub komór obecnych w kryształach. Zastosowanie standardowych zeolitów jako nośników powoduje, że osadzanie nanoklasterów fazy metalicznej następuje jedynie na powierzchni zewnętrznej kryształów, co sprzyja tworzeniu większych nanocząstek metalu, a tym samym wpływa na aktywność katalityczną otrzymanych preparatów. Jedną z dróg ominięcia tych ograniczeń jest zastosowanie jako aktywnych nośników, kryształów posiadających wolne mezo-/makroprzestrzenie, do których można wprowadzić wysoko zdyspergowaną fazę metaliczną. Wprowadzenie większej ilości nanoklasterów metalu, dostępnych dla cząsteczek reagentów poprzez kanały zeolitu, w których znajdują się silne centra kwasowe, pozwoli na otrzymanie bardziej efektywnych katalizatorów o właściwościach kwasowo-redoksowych. Celem badań podjętych w roku sprawozdawczym było przygotowanie serii zeolitów wysokokrzemowych typu MFI zawierających wtórny system mezo-/makrokomór oraz ich wykorzystanie jako nośników do osadzenia fazy metalicznej (Pd). Syntezę serii zeolitów typu MFI przeprowadzono wykorzystując jako matryce mezo-/makroprzestrzeni, mono- i polidispersyjne zawiesiny cząstek węgla oraz anionowego lateksu polistyrenowego.

Badania XRD wykazały wysoką krystaliczność oraz czystość fazową otrzymanych preparatów. Ich wysoką stabilność termiczną oraz odporność na dealuminację potwierdziły badania  $^{27}\text{Al}$  MAS NMR, przeprowadzone po wysokotemperaturowej eliminacji organicznych szablonów strukturotwórczych oraz zastosowanych mezo-makromatryc ze struktury kryształów. Obecność mezo-/makrokomór o różnych rozmiarach w otrzymanych kryształach została bezpośrednio potwierdzona przy pomocy Transmisyjnej Mikroskopii Elektronowej (TEM). Impregnację preparatów roztworami soli metalu ( $\text{PdCl}_2$ ) prowadzono metodą „incipient wetness”. Po przeprowadzonej redukcji impregnowanych preparatów stwierdzono obecność dużej liczby nanoklasterów Pd wewnątrz kryształów. Badania HRTEM wykazały, że wielkość nanoklasterów obecnych w wygenerowanych mezo-/makrokomorach jest znacznie mniejsza (2-4 nm) od wielkości klasterów Pd na powierzchni kryształów (10-25 nm). Równocześnie wprowadzenie znacznej części użytego palladu do wnętrza kryształów w dużym stopniu zmniejsza ilość oraz wielkość nanoklasterów Pd utworzonych na powierzchni zewnętrznej kryształów zeolitu MFI.



## 6. Układy multimodalne o podwyższonych właściwościach kwasowych jako podstawa nowych układów katalitycznych

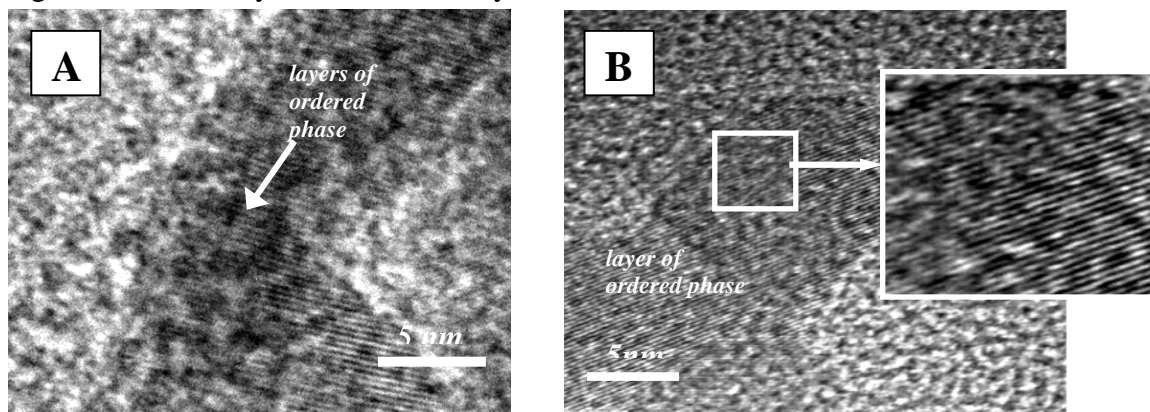
Projekt badawczy promotorki N205 048 31/2120 [2006-2008]

(promotor: doc. Mirosław Derewiński, doktorant: mgr Veronika Pashkova)

Materiały kompozytowe o hierarchicznej strukturze porowatej (mikro/mezo/makro) oraz zawierające zdyspergowaną fazę zeolitową stanowią nową grupę materiałów, które mogą być wykorzystane jako aktywne katalizatory w transformacji większych cząsteczek reagentów. Jedną z obiecujących dróg otrzymania takich materiałów jest częściowa, hydrotermalna rekrytalizacja mezo-/makroporowatych amorficznych glinokrzemianów, wstępnie zaimpregnowanych roztworami odpowiednich szablonów strukturotwórczych (templatów). Głównym celem podjętych badań było sprawdzenie, czy wykorzystując tę metodę można otrzymać materiały kompozytowe zawierające nanodomeny zeolitowe, oraz jak zmiana parametrów procesu hydrotermalnego wpływa na właściwości syntezowanych preparatów.

Materiały kompozytowe zawierające rozproszone nanodomeny zeolitów typu FAU i BEA otrzymano w wyniku hydrotermalnej syntezy stosując jako układy wyjściowe standardowe glinokrzemiany o różnym składzie molowym (Si/Al odpowiednio 3.3 i 7.8). Zmiany koordynacji oraz otoczenia atomów Al zachodzące w trakcie syntezy kompozytów monitorowano przy pomocy spektroskopii  $^{27}\text{Al}$  MAS NMR. Proces tworzenia nanodomen uporządkowanego materiału mikroporowatego śledzono metodą TEM (Rys. 1). W badaniach właściwości kwasowych zastosowano badania sorpcji cząsteczek zasad azotowych oraz CO, monitorowane przy pomocy spektroskopii w podczerwieni.

Określono warunki preparatyki prowadzące do otrzymania materiałów kompozytowych zawierających rozproszone w amorficznej matrycy fazy zeolitowe typu FAU oraz BEA. Podobne wyniki badań (NMR, TEM, badania sorpcyjne) uzyskanych dla obu układów wskazują na podobny mechanizm tworzenia preparatów zawierających oba typy zeolitów. Czynnikiem decydującym o efektywności procesu selektywnej rekrytalizacji w materiały kompozytowe jest skład chemiczny wyjściowych amorficznych preparatów oraz ilość użytego szablonu strukturotwórczego. Przeprowadzone badania niskotemperaturowej sorpcji azotu wykazały, że pomimo częściowej transformacji do fazy zeolitowej, nowe preparaty posiadają zachowaną w znacznym stopniu otwartą strukturę porowatą, typową dla wyjściowych amorficznych glinokrzemianów. Badania właściwości kwasowych potwierdziły obecność w nowych materiałach silnych centrów protonowych (typu Brønsteda), typowych dla glinokrzemianowych sit molekularnych.



Rys. 1. Zdjęcia TEM mikroporowatych warstw FAU (A) i BEA (B) powstających w pierwszych etapach rekrytalizacji wyjściowych, amorficznych glinokrzemianów (Si/Al odpowiednio 3.3 i 7.8)

## 7. Badanie właściwości centrów Cu(I) w zeolitach typu fojazytu i MFI i ich oddziaływań z cząsteczkami metodami chemii kwantowej i metodami hybrydowymi

Projekt badawczy promotorski N204 180 31/3999 [2006-2008]  
(promotor: prof. Ewa Broclawik, doktorant: mgr Paweł Rejmak)

Celem badań w ramach tego zadania w roku 2007 było wyjaśnienie mechanizmu aktywacji NO na centrach miedziowych w zeolitach typu fojazytu (FAU) i MFI a następnie powiązanie właściwości katalitycznych zeolitów ze strukturą sieci i zawartością glinu. Obliczenia były prowadzone hybrydowymi metodami mechaniki kwantowej i mechaniki molekularnej (QM/MM) przy użyciu programu QMPOT, sprzęgającego programy Turbomole (część QM) i Gulp (część MM). Badania obejmują optymalizację geometrii, obliczanie ciepła adsorpcji i harmoniczną analizę wibracyjną. Wyniki wcześniejszych obliczeń dla adsorpcji CO na zeolitach FAU zostały opublikowane w jednej pracy w PCCP.

Do modelowania adsorpcji NO w wysokoglinowych zeolitach typu FAU zostały użyte modele sieci o różnej zawartości glinu i klasterzy (w części QM) o różnej wielkości i liczbie atomów Al. Niskoglinowe zeolity typu MFI były modelowane przez komórkę elementarną/klaster z jednym atomem Al.

Zakończono ostatni etap badania form mononitrozylowych, jakim było przeprowadzenie obliczeń z większymi klasterami w części QM – 16T dla centrum II i 20-22T dla centrum III ( $nT$  oznacza liczbę atomów skoordynowanych tetraedrycznie – Si lub Al – w klasterze) dla wybranych struktur w zeolitach typu FAU. Zwiększenie klastera (dotychczasowy rozmiar – 12T) dla centrum II nie zmienia ilościowo wyniki, zwiększenie klastera dla centrum III z 8T do 20-22T nie zmienia jakościowych wyników, otrzymane częstości NO są około  $10\text{ cm}^{-1}$  wyższe dla większych klasterów.

Zakończono modelowanie adsorpcji dwóch cząsteczek NO na centrach Cu(I) w FAU i MFI. Spośród znalezionych form dinitrozylowych najbardziej stabilne okazały się stany singletowe, w których między dwiema zaadsorbowanymi cząsteczkami NO tworzy się wiązanie  $\pi$ . Stwierdzono, że adsorpcja drugiej cząsteczki NO zachodzi ze zbliżonymi energiami dla centrów typu II i III (energia adsorpcji pojedynczej cząsteczki NO jest niemal 2 razy większa na centrum III niż na centrum II). Wyniki dla form dinitrozylowych w MFI są w trakcie opracowania.

Na podstawie wcześniejszych obliczeń dla mononitrozylków Cu(I) w FAU zaproponowane wyjaśnienie eksperymentalnych widm IR dla tych układów. Obecnie przygotowana jest publikacja na temat adsorpcji NO w miedziowych formach FAU.

## 8. Określenie czynników determinujących powstawanie kontaktu trójfazowego w czasach milisekundowych

Projekt badawczy promotorski N204 012 31/0279 [2006-2008]  
(promotor: prof. Kazimierz Małys, doktoranr: mgr Jan Zawala)

Celem pracy jest określenie wpływu prędkości (energii kinetycznej) oraz dynamicznej warstwy adsorpcyjnej tworzącej się na powierzchni pęcherzyka w roztworach surfaktantów na przebieg kolizji i kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego na powierzchni różnych ciał stałych. Prowadzone są również badania nad wpływem elektrycznego ładunku granic międzyfazowych na powierzchniach: ciecz-gaz i ciecz-ciało stałe na powstawanie kontaktu trójfazowego.

W okresie sprawozdawczym wykonano pomiary mające na celu określenie przyspieszeń, profili prędkości lokalnych, tj. prędkości pęcherzyka w różnych odległościach od kapilary, oraz ich stopnia deformacji. Pomiary wykonano w czystej wodzie, roztworach wybranych elektrolitów i w roztworach jonowych (kationowych i anionowych) oraz niejonowych surfaktantów. Wyznaczono profile prędkości lokalnej unoszącej się bańki i obliczono prędkości graniczne. Wykazano, że w przypadku roztworów elektrolitów prędkość oraz deformacja kształtu pęcherzyków nie różni się od parametrów zmierzonych w czystej wodzie. W roztworach surfaktantów natomiast początkowe przyspieszenia baniek zmniejszały się wraz ze wzrostem stężenia roztworu od wartości  $930\text{cm/s}^2$  w wodzie destylowanej do około  $500\text{cm/s}^2$  w roztworach stężonych. Dla wszystkich badanych surfaktantów wykazano, że prędkości graniczne maleją wraz ze wzrostem stężenia od  $34.7\text{ cm/s}$  w czystej wodzie do ok.  $15\text{ cm/s}$  w stężonych roztworach. W przypadku mniej stężonych roztworów obserwowane było maksimum na profilach prędkości lokalnych, co było dowodem na tworzenie się dynamicznej struktury adsorpcyjnej na powierzchni pęcherzyka. Maksimum to nie występowało w przypadku dużych stężeń, co świadczyło, że dynamiczna warstwa adsorpcyjna tworzyła się praktycznie natychmiast po oderwaniu się pęcherzyka od kapilary.

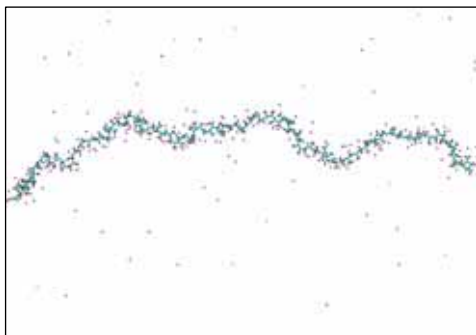
Wykazano także, że stan warstwy adsorpcyjnej oraz rodzaj substancji powierzchniowo aktywnej tworzącej tą warstwę ma znaczący wpływ na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego podczas kolizji bańki z powierzchnią ciała stałego, która obdarzona jest ładunkiem elektrycznym. Pomiary wykonano wykorzystując dwa różne surfaktanty posiadające identyczną długość łańcucha – n-oktanol oraz bromek n-oktylo-trójmetyloamoniowy. Obserwowano kolizję pęcherzyka z ujemnie naładowaną powierzchnią miki w tak dobranych stężeniach wymienionych surfaktantów, które zapewniały identyczne pokrycie adsorpcyjne na powierzchni pęcherzyka (2%). Podczas kolizji z ujemnie naładowaną powierzchnią miki dochodziło do utworzenia TPC tylko w roztworach bromku n-oktylo-trójmetyloamoniowego (OTABr). Powstania kontaktu trójfazowego nie obserwowano podczas kolizji pęcherzyka, prowadzonych w identycznych warunkach, w roztworach n-oktanolu oraz w czystej wodzie. Utworzenie kontaktu trójfazowego i przyłączenie się pęcherzyka do ujemnie naładowanej powierzchni miki w roztworze kationowego surfaktantu (OTABr) świadczy o roli elektrycznego ładunku powierzchniowego w stabilności ciekłych filmów – adsorpcja kationowego surfaktantu spowodowała zmianę ładunku elektrycznego powierzchni pęcherzyka. Kiedy obie powierzchnie międzyfazowe tworzące film są naładowane przeciwnie, siły elektrostatycznego przyciągania decydują o niestabilności filmu i jego rozerwaniu. W przypadku czystej wody i roztworu niejonowego surfaktantu, stabilność filmu zapewniały siły elektrostatycznego odpychania pomiędzy jednakowo naładowanymi powierzchniami międzyfazowymi.

## 9. Określenie wpływu zaadsorbowanych polielektrolitów na kinetykę osadzania i topologię monowarstw cząstek

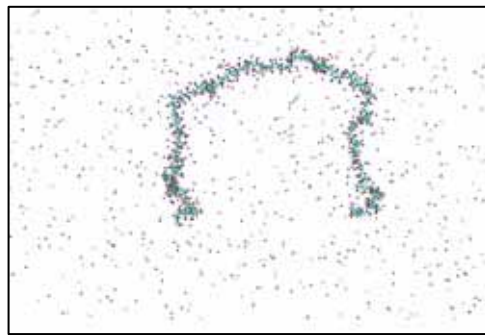
Projekt badawczy promotorski N 204 150 32/3822 [2007-2009]  
(promotor: prof. Zbigniew Adamczyk, doktorant: mgr Anna Bratek)

W ramach założonych zadań wynikających z planu na 2007 rok wykonane zostały następujące prace: Konstrukcja wiskozymetru kapilarnego oraz pomiary lepkości dynamicznej wodnych roztworów polielektrolitów. Stosowanym do tych pomiarów polielektrolitem był poli(kwas akrylowy) PAA o średnim ciężarze cząsteczkowym  $M_w = 12\ 000, 70\ 000, 145\ 000$ . Pomiary te zostały wykonane w funkcji stężenia, siły jonowej oraz pH. Wyniki pomiarów lepkości dynamicznej zostały zinterpretowane w oparciu o model hydrodynamiczny, który znacznie lepiej opisuje własności makromolekuł niż modele dotychczas stosowane w literaturze. Model ten umożliwia wyznaczenie promieni hydrodynamicznych, dzięki czemu możliwa jest dalsza interpretacja struktury makrocząstek w roztworach wodnych. Charakterystyka fizykochemiczna makrocząstek polielektrolitów (PAA, PAH- chlorowodorek polialliloaminy, PEI- poli(etylenoimina)) w roztworach wodnych przeprowadzona została poprzez wyznaczenie ich współczynników dyfuzji (metodą PCS) i ruchliwości elektroforetycznej w zależności od rodzaju polielektrolitu, jego stężenia oraz siły jonowej ośrodka. Pomiary te zostały wykonane przy pomocy przyrządów Zetasizer Nano ZS, firmy Malvern, którego zakres pomiarowy pozwala na detekcję obiektów o rozmiarach nanometrycznych a więc makrocząstek polielektrolitów. Wyznaczone z pomiarów dynamicznego rozpraszania światła promienie hydrodynamiczne dla makromolekuł PAA wykazują dużą zgodność z wartościami obliczonymi z modelu hydrodynamicznego wskazując, iż pomiary wiskozymetryczne są czułą metodą służącą określeniu struktur makromolekuł. Jednocześnie pomiary ruchliwości elektroforetycznej makrocząstek pozwalają na wyznaczenie efektywnego stopnia jonizacji makromolekuł, który w przeciwieństwie do nominalnego szeroko stosowanego w literaturze jest znacznie mniejszy, czego konsekwencją są odmienne zachowania makrojonów w roztworach wodnych. Kolejnym zadaniem wynikającym z planu na 2007 rok było modelowanie struktury polielektrolitów w roztworach wodnych przy pomocy dynamiki molekularnej. Przedmiotem tych symulacji był poli(kwas akrylowy) dla którego wykonano symulacje struktury w zależności od siły jonowej oraz stopnia jonizacji. Przy pomocy tej metodyki symulacji wyznaczono parametry o podstawowym znaczeniu dla opisu kinetyki adsorpcji a mianowicie: efektywny przekrój łańcucha, kształt cząsteczki (Rys. 1), efektywny stopień jonizacji (ładunek nieskompensowany) oraz krytyczne stężenie elektrolitu powodujące kondensację ładunku na cząsteczce.

a)



b)



Rys.1. Konformacje cząstek polielektrolitów PAA o ciężarze cząsteczkowym 12 000 w roztworach wodnych wyznaczone przy pomocy dynamiki molekularnej a)  $I = 10^{-3} \text{ M}$ ,  $\alpha_i = 1.0$ , b)  $I = 10^{-1} \text{ M}$ ,  $\alpha_i = 1.0$ .

## 10. Osadzanie modelowych mikrokapsulek na powierzchniach metalicznych modyfikowanych przez adsorpcję multiwarstw polielektrolitów

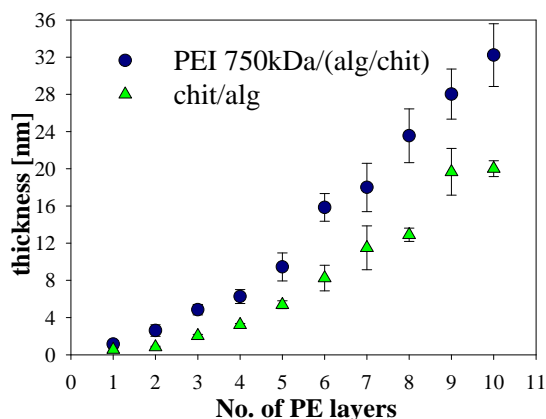
Projekt badawczy promotorski N 204 2145 33 [2007-2009]  
(promotor: doc. Piotr Warszyński, doktorant: mgr Anna Trybała)

Modyfikacja powierzchni metalicznych przez adsorpcję nano- i mikrokapsulek ma istotne znaczenia w zastosowaniach biomedycznych (np. implanty kostne, stenty pokryte kapsułkami zawierającymi leki proliferacyjne) i w technologii zapobiegania korozji. Ze względu na tego typu zastosowania, celem projektu jest badanie osadzania modelowych mikrokapsulek na gołych powierzchniach metalicznych i powierzchniach modyfikowanych przez adsorpcję multiwarstw polielektrolitowych (PEM). PEM są często używane do modyfikacji właściwości powierzchni i jako promotory adhezji.

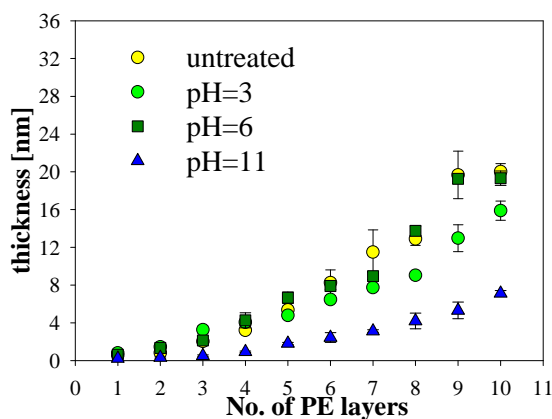
W ramach założonych zadań wynikających z planu na rok 2007 wykonane zostały następujące prace:

- tworzenie multiwarstw zbudowanych z polielektrolitów pochodzenia naturalnego (PE): (polikationy - Chitosan - CHIT, poly(etylenoimina) - PEI, polianion alginina –ALG; metodą LbL na powierzchni krzemu
- charakterystyka multiwarstw polielektrolitowych nanoszonych z różnych warunków przez elipsometryczne pomiary grubości.

Aby zbadać wpływ PEI jako pierwszej warstwy na grubość multiwarstw polielektrolitowych przygotowano filmy (CHIT/ALG)<sub>n</sub>, PEI(ALG/CHIT)<sub>n</sub> o różnych grubościach. Pomiaru grubości dokonywana metodą elipsometryczną. Stwierdzono (Rys. 1), że działanie PEI jako warstwy zakotwiczącej dla budowy narastającego filmu powoduje wzrost grubości filmów w porównaniu z filmami bez PEI jako pierwszej warstwy. Spowodowane to jest rozgałęzioną budową PEI, która działa jak rusztowanie dla budowy narastającego filmu. Rozważając stabilność multiwarstw polielektrolitowych w różnych warunkach pH stwierdzono (Rys. 2.), że zarówno środowisko zasadowe jak i kwasowe powoduje spadek grubości filmu (CHIT/ALG), efekt ten jest szczególnie istotny w środowisku zasadowym, obserwuje się spadek grubości filmu o ok. 60%. W pH =11 chitosan jest praktycznie nie naładowany, co powoduje desorpcję warstwy chitosanowej. Efekt ten jest również obserwowany przy zastosowaniu PEI jako pierwszej warstwy. Natomiast kondycjonowanie w środowisku obojętnym i kwasowym nie powoduje spadku grubości filmów PEI(ALG/CHIT).



Rys. 1. Zależność grubości filmów (CHIT/ALG) i PEI(ALG/CHIT) od ilości warstw polielektrolitowych.



Rys. 2. Zależność grubości filmu (CHIT/ALG) od ilości warstw polielektrolitowych dla filmów niekondycjonowanych i kondycjonowanych w pH=3, pH=6 i pH=11.

## 11. Transformacje węglowodorów terpenowych na katalizatorach zeolitowych

Projekt badawczy promotorski N N204 1240 33 [2007-2009]

(promotor: prof. Bogdan Sulikowski, doktorant: mgr Łukasz Mokrzycki)

Rosnące zanieczyszczenie środowiska naturalnego jak i stopniowe wyczerpywanie się tradycyjnych (kopalnych) źródeł surowców przemysłu chemicznego, powodują, że znaczenie odnawialnych i naturalnych zasobów i wykorzystywanych przez nie technologii ma coraz większe znaczenie. Węglowodory terpenowe (terpeny) są bardzo ważnym naturalnym surowcem przemysłu spożywczego, perfumeryjnego i farmaceutycznego. Jednym z najpowszechniej występujących węglowodorów terpenowych jest  $\alpha$ -pinen.

Reakcja izomeryzacji tego węglowodoru jest procesem o istotnym znaczeniu przemysłowym. Proces ten prowadzony jest obecnie w reaktorze zbiornikowym pod ciśnieniem atmosferycznym zakresie temperatur 403-418 K. Katalizatorem w tej reakcji jest modyfikowany kwasem siarkowym (VI) - uwodniony tlenek tytanu, który posiada słabe właściwości kwasowe. Głównymi i najbardziej pożądanymi produktami przekształcenia  $\alpha$ -pinenu są kamfen (produkcja kamfory), limonen (rozpuszczalniki) oraz *p*-cymen (PET). Mankamentem katalizatora przemysłowego reakcji izomeryzacji jest jego słaba aktywność oraz powodowanie korozji instalacji przemysłowych, przez co zastąpienie go bardziej wydajnym układem jest bardzo pożądane.

Szerokie możliwości otwiera zastosowanie w tej reakcji katalizatorów zeolitowych, w których funkcję kwasowości można regulować w bardzo szerokich granicach. Istotę podejmowanych badań stanowi zatem porównanie właściwości zeolitów ZSM-5, ZSM-12 oraz MCM-22, a także ich modyfikowanych form, jako katalizatorów izomeryzacji  $\alpha$ -pinenu. Jednym z elementów nowości projektu jest modyfikacja wybranych zeolitów na drodze procesu desilikacji.

W ramach tego projektu wykonano wstępne syntezy zeolitów typu ZSM-12 o module krzemowym od 40 do 75. Podjęto też przygotowania do syntezy prekursora i zeolitu typu MCM-22. Materiały te poddano charakterystyce metodami XRD, SEM, NMR oraz sorpcji azotu. Dobrano parametry rozdziału chromatograficznego produktów reakcji izomeryzacji  $\alpha$ -pinenu i przeprowadzono kalibrację chromatografu gazowego w oparciu o wzorce:  $\alpha$ -pinen, kamfen, limonen,  $\alpha$ -terpinen,  $\gamma$ -terpinen i *p*-cymen.



## **PROJEKTY BADAWCZE HABILITACYJNE**





## **1. Mechanizmy reakcji na mononuklearnych centrach żelazowych i manganowych w niehemowych enzymach aktywujących tlen**

Projekt badawczy habilitacyjny N204 173 31/3823 [2006-2008]

(*dr Tomasz Borowski, prof. Ewa Brocawik*)

W ramach tego projektu badawczego zaplanowano zbadanie, przy użyciu metod chemii kwantowej, mechanizmów reakcji katalitycznych dla trzech metaloenzymów: dwóch wiążących żelazo w centrum aktywnym (PCD, ACO) oraz jednego wiążącego jon manganu (OxDC). Wybrane enzymy wykorzystują tlen cząsteczkowy w charakterze substratu (PCD, ACO) lub aktywatora (OxDC) i katalizują reakcje: otwarcia pierścieni hydrochinonów (PCD), rozcięcia łańcucha karotenoidów (ACO), oraz dysproporcjonowania toksycznego oksalanu do  $\text{CO}_2$  i  $\text{HCOO}^-$  (OxDC).

W minionym roku dokonano zakupu większości niezbędnego sprzętu komputerowego (serwer obliczeniowy), oraz licencji na program obliczeniowy Jaguar.

Postęp prac badawczych:

- zbadano mechanizm reakcji katalitycznej dla zależnej od  $\text{Fe}^{3+}$  oksygenazy hydrochinonów (PCD),
- przeprowadzono badania nad mechanizmem utleniania prowitaminy A przez zależną od  $\text{Fe}^{2+}$  oksygenazę apokarotenoidów (ACO).



## **PROJEKTY BADAWCZE POL POST DOC II**

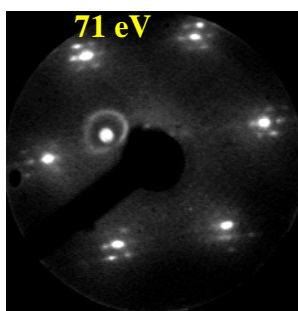


# 1. Epitaksjalne nanostruktury tlenkowe na metalicznych podłożach monokrystalicznych

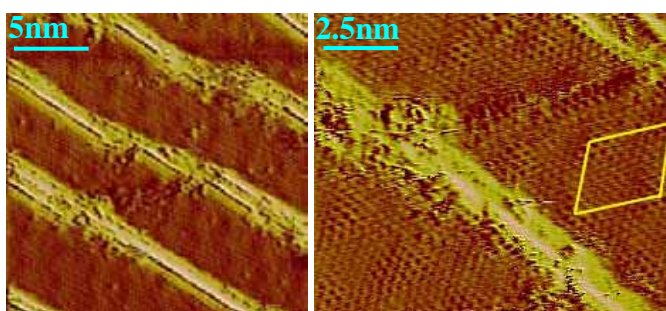
Projekt badawczy POL-POSTDOC II [2006-2009]

(kierownik projektu: dr Dorota Wilgocka-Ślęza)

Zgodnie z harmonogramem projektu realizowano jego pierwsze zadanie: „Opracowanie technologii preparatyki nanostruktur tlenkowych”. Otrzymywano tlenek żelaza FeO na wycylnym monokryształ Pt(997) w warunkach ultrawysokiej próżni. Pierwszym etapem preparatyki było przygotowanie powierzchni monokryształu o czystości atomowej i wysokim stopniu uporządkowania strukturalnego. Typowa procedura obejmowała wielokrotne (do kilkudziesięciu) cykle bombardowania jonami argonu oraz wygrzewania w atmosferze tlenu i krótkiego grzania do wysokiej temperatury. Obrazy LEED i STM potwierdziły dobrze uporządkowaną strukturę stopni odległych o ok. 2.1 nm. Na tak przygotowane podłoże nanoszono ze źródła termicznego ultracienkie epitaksjalne warstwy Fe, wygrzewano je, a następnie utleniało przy różnych ekspozycjach tlenu i przy różnych temperaturach. Na każdym etapie preparatyki warstwy charakteryzowano metodami AES, LEED oraz STM. Grubość warstw żelaza dobierano tak, aby uzyskać warstwy FeO o nominalnej grubości od 0.5 do 1.5 monowarstwy (ML). Stwierdzono, że najlepsze uporządkowanie i jednorodność powierzchni tlenku uzyskuje się dla warstw o nominalnej grubości do ok. 1 ML. Przykładowe obrazy LEED oraz STM przedstawiono odpowiednio na rysunkach 1 i 2. Sześciokrotna symetria obrazu dyfrakcyjnego wskazuje na orientację (111) powierzchni, zaś nadstrukturę objawiającą się obecnością satelitów wokół każdej plamki należy przypisać efektowi niedopasowania sieciowego pomiędzy monowarstwą FeO (111) oraz powierzchnią Pt(111) (niedopasowanie wynosi 11%). Struktura stopni podłoża jest słabo rozpoznawalna na złożonych obrazach dyfrakcyjnych. Obrazy STM o atomowej rozdzielczości w pełni potwierdzają obecność nadstruktury o periodyczności ok. 26 Å oraz wskazują na wysoki stopień uporządkowania powierzchni. Ponadto, co ważne z punktu widzenia inżynierii powierzchni tlenku, monoatomowe stopnie podłoża są idealnie odwzorowane na powierzchni tlenku. Dla warstw tlenku grubszych niż 1 ML, na podstawie pomiarów STM stwierdzono wzrost Stranskiego-Krastanowa: na pierwszej warstwie z rozpoznawalną dla FeO nadstrukturą pojawiały się wydłużone, nieuporządkowane wyspy.



Rys. 1.



Rys. 2.

## **2. Ustalenie norm dopuszczalnych fluktuacji mikroklimatu dla drewna polichromowanego**

Projekt badawczy POL-POSTDOC II [2006-2009]

(kierownik projektu: dr Michał Łukomski)

Głównym celem projektu było dokładne ilościowe ustalenie fluktuacji parametrów powietrza bezpiecznych dla pokrytych polichromią powierzchni drewnianych. W pierwszym roku realizacji projektu, główny nacisk położony został na przygotowanie próbek imitujących średniowieczne malarstwo tablicowe, na potrzeby przyszłych testów i analiz. Podkład malarski (zaprawa), będący mieszaniną kleju zwierzęcego i kredy, jest najbardziej kruchą częścią obrazu, która ponadto podlega działaniu największych sił wywołanych fluktuacjami mikroklimatu. W ramach grantu opracowana została procedura wykonania warstwy zaprawy o parametrach mechanicznych podobnych do właściwości materiałów historycznych.

W ramach projektu zostały rozpoznane i przeanalizowane technologie stosowane historycznie w malarstwie panelowym. Na podstawie przepisów znalezionych w literaturze fachowej przygotowano próbki zaprawy o różnym stosunku wypełniacza do spoiwa. Ostatecznie do dalszych badań wybrana została zaprawa o stosunku wypełniacza do spoiwa równym 95%; zdecydowało o tym podobieństwo techniki przygotowania oraz struktury uzyskanego materiału do zapraw malarskich występujących w malarstwie panelowym i używanych w procesie konserwacji. Przygotowano cienkie warstwy zapraw, z których następnie wykonano próbki odpowiednie do przeprowadzenia pomiarów właściwości mechanicznych podczas rozciągania.

Aby jak najlepiej naśladować materiały historyczne, przeprowadzono proces sztucznego postarzania próbek w warunkach podwyższonej temperatury i wilgotności wewnątrz komory klimatycznej. W oparciu o dane literaturowe wybrano temperaturę 70<sup>0</sup>C i wilgotność względną 80%. Obecnie trwa analiza mechanicznych właściwości próbek postarzanych sztucznie przez 1 do 6 tygodni w celu ustalenia optymalnych warunków oraz czasu postarzania. Planowane jest również zgromadzenie jak największej ilości próbek zapraw historycznych i przebadania ich mechanicznych właściwości na rozciąganie w celach porównawczych.

Wszystkie testy mechaniczne (zależność odkształcenia od siły, sorpcyjna rozszerzalność izotermiczna, płynięcie materiału) wykonywane są przy pomocy urządzenia Tritec 2000 DMA (Dynamic Mechanical Analyser). Procedura pomiarowa (ilość próbek, początkowa szybkość narastania odkształcenia, interpretacja uzyskanych wyników) została opracowana w oparciu o zmodyfikowane standardy ASTM i CEN. Istotnie zaawansowana została budowa kontrolera temperatury i wilgotności koniecznego do wykonania zasadniczej części pomiarów.

Równoległe do analiz technologicznych i mechanicznych, rozwinięte zostały metody optyczne, których celem jest monitorowanie odspojień warstwy dekoracyjnej od drewnianego podłoża oraz obserwacja jej mechanicznych uszkodzeń. W tym celu ze środków tego projektu, jak również projektu PL0086 Finansowego Mechanizmu EOG zbudowany został interferometr plamkowy.

### 3. Nowe chiralne kompleksy Ru(II): synteza i zastosowanie w katalizie asymetrycznej w układach homogenicznych i heterogenizowanych na mezoporowatych nośnikach.

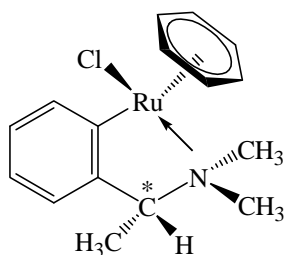
Projekt badawczy POL-POSTDOC II [2006-2009]

(kierownik projektu: dr Dorota Duraczyńska)

Celem projektu jest:

- opracowanie uniwersalnej metody otrzymania chiralnych związków Ru(+2),
- opracowanie metodyki osadzania otrzymanych związków na nośnikach typu mezoporowatych sit molekularnych
- określenie właściwości katalitycznych otrzymanych układów w wybranych reakcjach katalizy asymetrycznej.

W ramach tego projektu przygotowano i scharakteryzowano związek Ru(+2) zawierający chiralny ligand aminowy typu TMBA, którego strukturę przedstawiono poniżej. Przygotowano też związki wyjściowe, tj.:  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5)\text{Ru}(\text{CH}_3\text{CN})_3]\text{PF}_6$  oraz  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{Ru}(\text{CH}_3\text{CN})_3]\text{PF}_6$  do syntezy kompleksów zawierających chiralną fosfinę DuPhos.



Ponadto opracowano metodę osadzania kationowych związków Ru(+2) na nośnikach mezoporowatych typu HMS, FSM i SBA. Badany przez nas kompleks  $[(\eta^5\text{-MeC}_5\text{H}_4)\text{Ru}(\eta^3\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)(\eta^1\text{-PPh}_2\text{CHCH}_2)]^+$  został osadzony na serii w/w. nośników na drodze wymiany jonowej. Heterogenizacja ta warunkowana jest oddziaływaniem pomiędzy kationami kompleksu Ru a ujemnie naładowanymi centrami nośnika, utworzonymi na skutek podstawienia jonów  $\text{Si}^{4+}$  przez  $\text{Al}^{3+}$ .

Osadzone kompleksy Ru są aktywnymi katalizatorami w reakcji uwodornienia fenyloacetyleny.





## **PROJEKTY BADAWCZE ZAMAWIANE**



# 1. Nowe materiały katalityczne jako podstawa procesów chemicznych przyjaznych dla środowiska

Projekt badawczy zamawiany PBZ-KBN-116/T09/2004 [  
(koordynator projektu: prof. Małgorzata Witko)

W ramach projektu wykonywanych jest 13 tematów, z tego 3 w Instytucie:

1e - Pd zdyspergowany w matrycach polimerowych – nowe układy katalityczne dla procesów uwodorniania węglowodorów nienasyconych (kierownik tematu: doc. A. Drelinkiewicz)

## ***Charakteryzacja właściwości fizykochemicznych układów zawierających pallad***

Przeprowadzono badania fizykochemiczne (FTIR, XPS, XRD, SEM, TEM i HRTEM, pęcznienie) dla katalizatorów bazujących na żelach mikroporowatych (FCN), polimerze poli(4-winylopirydyna) (PVP) oraz polianilina (PANI).

**Pd/FCN:** wprowadzenie palladu do żywicy FCN zawierającej grupy aminowe (-NH<sub>2</sub>) powoduje stopniowy spadek pęcznienia polimeru w THF. Zdolność ta maleje bardziej dla katalizatorów Pd(VOL), w których Pd obecny jest w całej objętości matrycy co przypisano sieciowaniu polimeru przez jony Pd<sup>2+</sup>. Zredukowane katalizatory wykazują obecność nano-klastery Pd (HRTEM).

**Pd/PVP:** katalizatory (1wt %Pd) syntezowano stosując PVP (Aldrich) z roztworów wodnych PdCl<sub>2</sub> zawierających HCl, CsCl, LiCl. Stwierdzono że metoda syntezy Pd-H, Pd-Cs, Pd-Li wpływa na sposób wiązania jonów Pd<sup>2+</sup>, który jest wynikiem hydrolizy kompleksów palladu ułatwionej zasadowym polimerem oraz na wielkość krystalitów Pd utworzonych w wyniku redukcji katalizatorów wodorem. Najlepiej zdyspergowany Pd uzyskano w katalizatorach 1%Pd-Li, 1%Pd-H (d = 4.2 nm), najmniej w 1%Pd-Cs (d = 5.7 nm)

**Pd/PANI:** stosowano 2 rodzaje polianiliny (Aldrich) różniące się 10-krotnie długością łańcucha, PANI-Dl i PANI-Kr. W obydwu polimerach w trakcie syntezy jony palladu ulegają redukcji do Pd-metal (FTIR, XPS). Długość łańcucha PANI wpływa na wielkość krystalitów Pd, nano-clastery Pd obecne są w 2%Pd/PANI-Dl, w 2%Pd/PANI-Kr występują krystality większe Pd (d = 15.6 nm)

## ***Uwodornianie 2-butyn-1,4-diolu (B3-D) w obecności Pd/FCM, Pd/PVP i Pd/PANI***

Przeprowadzono testy katalitycznego uwodorniania alkinu, 2-butyn-1,4-diolu (B3-D), w reaktorze typu „batch”, kontrolując zużycie wodoru oraz skład mieszaniny reakcyjnej (GC).

**Katalizatory Pd/FCN:** przy tej samej zawartości Pd (0.125 – 0.5 wt % Pd) katalizatory syntezowane metodą (SF) (pallad wprowadzany z roztworów wodnych PdCl<sub>2</sub>) charakteryzowała znacznie wyższa aktywność. Selektywność do B2-D (alken) była bardzo wysoka (ca. 95 %) dla obydwu serii katalizatorów, SF i VOL. Te korzystne właściwości Pd/FCN wynikają z wpływu grup aminowych obecnych w matrycy polimeru.

**Katalizatory Pd/PVP:** seria Pd-H, Pd-Cs i Pd-Li (1wt%Pd). Reakcję prowadzono w rozpuszczalnikach o różnej polarności (woda, pentanol, octan etylu). Stwierdzono, że metoda syntezy wpływała na aktywność katalizatorów, najaktywniejsze są Pd-H, najmniej aktywne serii Pd-Cs. W roztworze wodnym i octanie etylu, uwodornianie do alkenu, B2-D przebiega z wysoką selektywnością (ok. 90 %), wpływ metody syntezy ujawnia się w ilości produktów ubocznych, których najwięcej (ok. 30 %) jest w obecności Pd-H, zdecydowanie mniej dla Pd-Cs i Pd-Li. Obserwowane różnice w pracy katalizatorów Pd-H, Pd-Cs i Pd-Li związane są nie tylko z różną dyspersją Pd (najwyższa dla Pd-Li) ale i z dostępnością Pd dla reagentów.

2c - Opracowanie technologii otrzymywania nanostrukturalnych katalizatorów tlenkowych o programowalnych właściwościach do neutralizacji par toksycznych rozpuszczalników  
(kierownik tematu: dr T. Machej)

Określono związek pomiędzy składem chemicznym i właściwościami fizykochemicznymi czystych faz aktywnych typu MnAl-O, CuAl-O oraz CuMn-O a ich aktywnością katalityczną w testowej reakcji spalania toluenu. Stwierdzono, że aktywność katalityczna tlenkowych katalizatorów rośnie wraz z ich redukowalnością, przy czym najbardziej aktywne są układy Cu-Mn-O. Porównanie składu chemicznego powierzchni katalizatorów, wyznaczonego przy pomocy spektroskopii XPS, ze średnim składem preparatów wyznaczonym metodą analizy chemicznej, pozwoliło na opisanie kalcynowanych układów jako złożonych z krystalitów CuO, których powierzchnia pokryta jest amorficzną, bogatą w mangan warstwą. Wstępne badania wykazują, że kolejność aktywności katalitycznej ulega zmianie po przygotowaniu faz aktywnych w formie „washcoat”, zdanej do nałożenia na monolitowy nośnik. Efekt ten jest związany z modyfikacją składu fazowego kalcynowanych preparatów na skutek wymieszania zawiesin prekursorów z koloidalnym Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

3a - Synteza, badania spektroskopowe, katalityczne i obliczenia kwantowo-mechaniczne nowych katalizatorów zeolitowych do reakcji przyjaznych dla środowiska  
(kierownik tematu: prof. B. Sulikowski)

Prowadzono badania w celu otrzymania powtarzalnej procedury delaminacji prekursora zeolitu MCM-22. Syntezę prekursora zeolitu MCM-22 o stosunku Si/A=15 oraz Si/Al=40 wykonano w warunkach hydrotermalnych z rotacją w temperaturze 157 °C. Jako SDA użyto HMI. Otrzymane próbki scharakteryzowano metodami XRD i sorpcyjnymi. Stosując opracowaną procedurę delaminacji, zsyntezowano matryce delaminowanych, na które naniesiono z kolei naniesiono wybrany heteropolikwas i jego sól.

Badano redukcję Co<sup>3+</sup> i Co<sup>2+</sup> za pomocą H<sub>2</sub>, CO i formaldehydu. Stwierdzono, że najefektywniejszym reduktorem jest formaldehyd, utleniający się do jonów mrówczanowych. Określono także wpływ początkowej kwasowości zeolitu H-FER na status jonów Co<sup>3+</sup> i Co<sup>2+</sup> oraz ich aktywność katalityczną w selektywnej katalitycznej redukcji NO (SCR). Badano status jonów Co<sup>3+</sup> i Co<sup>2+</sup> w zeolitach Co-ZSM-5 i Co-FER za pomocą spektrometrii IR z wykorzystaniem CO i NO jako cząsteczki sondy. Stwierdzono obecność trzech rodzajów jonów Co<sup>3+</sup> o różnych właściwościach elektro-akceptorowych, oraz jonów Co<sup>2+</sup> w formie kationów wymiennych, klastrów tlenkowych (*oxide-like-clusters*), oraz *bulk* CoO. Stwierdzono także, że proporcje pomiędzy ilościami form Co zależą od składu zeolitu (Si/Al i Co/Al), oraz od sposobu jego uprzedniej obróbki. Doświadczenia z ko-adsorpcją piwalonitrylu i CO dostarczyły informacji o lokalizacji klastrów tlenkowych.

Wykonano również dodatkowe syntezy katalizatorów ferrierytowych, traktowanych w różny sposób przed wprowadzeniem jonów metali, kobaltu i indu. Wykonano testy katalityczne otrzymanych preparatów w reakcji selektywnej katalitycznej redukcji NO w obecności metanu jako reduktora.

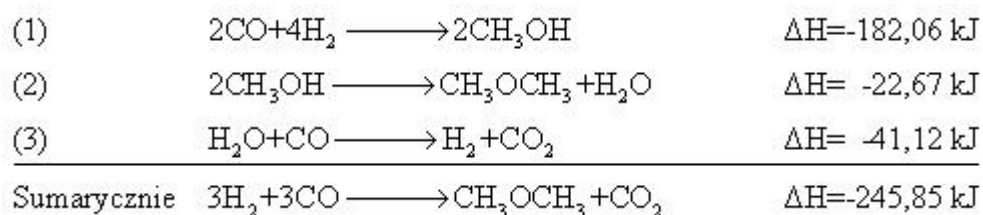
Wykonano obliczenia metodą DFT (chemia kwantowa) sprzężoną z mechaniką molekularną (poła siłowe) dla określenia właściwości i stabilności różnych centrów kobaltu(II) w ferrierycie jako potencjalnych centrów adsorpcji czy reakcji katalitycznej. Stwierdzono, że parametryzacja pól siłowych oparta na parametrach tlenkowych dla kobaltu lepiej odtwarza właściwości centrów w zeolicie. Kobalt(I) w pozycjach sieciowych β jest bardziej stabilny niż w pozycjach α. Na stabilność jonu kobaltu(II) ma wpływ dystrybucja par glinowych w obrębie danej pozycji, struktury o symetrycznym rozłożeniu par Al są najbardziej stabilne.

## 2. Chemia perspektywicznych procesów i produktów konwersji węgla

### Wielofunkcyjne katalizatory na osnowie minerałów warstwowych do jednoetapowego procesu: gaz syntezowy → metanol → eter dimetylowy

Projekt badawczy zamawiany PBZ-MEiN-2/2/2006 [2006-2010]  
(kierownik projektu: prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Celem projektu jest synteza i optymalizacja nowej generacji wielofunkcyjnych katalizatorów, przeznaczonych do bezpośredniej konwersji gazu syntezowego do eteru dimetylowego (DME), poprzez metanol jako produkt pośredni (proces STD: syngas-to-dimethylether).



W przedstawionym projekcie przewidywana jest synteza i optymalizacja wielofunkcyjnego katalizatora do procesu STD z wykorzystaniem unikatowych właściwości naturalnych i syntetycznych minerałów warstwowych: składowa katalizatora hybrydowego do syntezy metanolu otrzymawana będzie z prekursorów hydrotalkitowych natomiast w charakterze komponenty kwasowej wykorzystane zostaną odpowiednio modyfikowane naturalne glinokrzemiany warstwowe. W roku 2007 otrzymano serię hydrotalkitów Cu-Zn-Al stanowiących prekursorów składowej do syntezy metanolu. Badano wpływ warunków syntezy na właściwości otrzymanych materiałów. Jako zmienne parametry syntezy wybrano starzenie, sposób dodawania reagentów, pH syntezy i warunki rozkładu termicznego prekursora. Wykonano wstępne pomiary badania aktywności katalizatora do syntezy metanolu..



## **KRAJOWE SIECI BADAWCZE**





# 1. EKO-KAT Innowacyjne materiały katalityczne w ochronie środowiska

Krajowa sieć badawcza 75/E-68/SN-004/2006 EKO-KAT

(koordynator sieci: prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Głównym celem badań naukowych prowadzonych w ramach sieci naukowej EKO-KAT jest rozwój interdyscyplinarnych badań w zakresie projektowania i otrzymywania innowacyjnych materiałów katalitycznych przeznaczonych dla ochrony ekosystemu. Instytucje tworzące sieć to jednostki badawcze o najwyższym poziomie (wszystkie zaangażowane w sieć EKO-KAT instytuty PAN uzyskały najwyższą kategorię w ostatniej ocenie parametrycznej przeprowadzonej przez MNiSW):

1. Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie (koordynacja)
2. Instytut Chemii Fizycznej PAN w Warszawie
3. Instytut Chemii Przemysłowej w Warszawie
4. Instytut Fizjologii Roślin PAN w Krakowie
5. Instytut Fizyki Jądrowej PAN w Krakowie
6. Instytut Inżynierii Chemicznej PAN w Gliwicach
7. Instytut Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN w Krakowie
8. Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu

Prace badawcze obejmują 6 grup tematycznych, podejmujących problemy reprezentujące najbardziej aktualne trendy w projektowaniu materiałów katalitycznych:

- a) Katalizatory na osnowie nanocząstek metali szlachetnych w reakcjach usuwania zanieczyszczeń atmosfery (IKiFP, IChF, INTiBS). W roku 2007 realizowano temat: *Układy Au/spinele chromowe  $M\text{Cr}_2\text{O}_4$  [ $M=\text{Co}, \text{Mn}, \text{Fe}$ ],  $\text{Au}/\text{MgF}_2$ ,  $\text{Au}/\text{MgO}$ ,  $\text{PtAu}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  w reakcjach hydroodchlorowania oraz utleniania CO i węglowodorów.*
- b) Krzemiany warstwowe jako podstawa nanostruktur katalitycznych dla „chemii zielonej” (IKiFP, IChP, IFJ, IMiM). W roku 2007 realizowano temat: *Synteza i badanie własności fizykochemicznych układów polimer/napelniacz opartych na kompozytach hydrotalkitu i haloizytu oraz polietylenu.*
- c) Funkcjonalizowane materiały multimodalne dla selektywnych procesów katalitycznych i sorpcyjnych (IKiFP, ICh, IMiM). W roku 2007 realizowano temat: *Otrzymywanie materiałów o hierarchicznej strukturze porów (mikro-/mezo-/makro) w oparciu o mezo-makroporowate monolity krzemionkowe.*
- d) Innowacyjne katalizatory tlenkowe do utylizacji  $\text{CO}_2$  (IKiFP, ICh, IMiM). W roku 2007 realizowano temat: *Opracowanie metod syntezy katalizatorów  $\text{CuZnAl-O}$  do uwodorniania  $\text{CO}_2$  wykorzystujących prekursorzy hydrotalkitowe.*
- e) Enzymatyczne procesy biokatalityczne – teoria i praktyka (IKiFP, IFR). W roku 2007 realizowano temat: *Biokatalizatory w zastosowaniu do stereoselektywnej hydroksylacji węglowodorów - badanie spektrum substratowego EBDH, modelowanie struktury elektronowej substratów EBDH, modelowania mechanizmu reakcji.*
- f) Modelowe katalizatory metaliczne na monokrystalicznych podłożach tlenkowych – teoria i eksperyment (IKiFP, IFJ, IChF). W roku 2007 realizowano temat: *Badanie efektów rozmiarowych w strukturze elektronowej układów metal-metal i metal-tlenek na przykładzie  $\text{Fe}/\text{W}(110)$  i  $\text{Au}/\text{Fe}_3\text{O}_4$ .*

Wyniki prac zostały zaprezentowane na seminarium sprawozdawczym, które odbyło się dnia 7 września 2007 w IKiFP PAN



## **PROJEKTY 6. PROGRAMU RAMOWEGO UE**



## 1. Dynamics in Nano-Scale Materials Studied with Synchrotron Radiation

Projekt badawczy EU 6<sup>th</sup> FP NMP4-CT-2003-001516 DYNASYNC  
(STREP koordynacja) [2004-2007]  
(koordynator projektu: prof. Józef Korecki)



Projekt Dynasync realizowany był w okresie 1.03.2004 do 28.02.2007 i w związku z tym większość zadań merytorycznych zakończona została w latach 2004-2006. W dwóch miesiącach roku 2007 Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN finalizował zadania rozpoczęte w latach ubiegłych:

### 1. Porównanie teoretycznych i doświadczalnych VDOS w wybranych układach wielowarstwowych

Zadanie obejmowało obliczenia teoretyczne właściwości wibracyjnych układów wielowarstwowych oraz ich porównanie z pomiarami fononowych gęstości stanów przy pomocy jądrowego nieelastycznego rozpraszania promieniowania synchrotronowego. W ramach zadania badane były właściwości magnetycznych i strukturalne układów wielowarstwowych  $Fe_n/Au_n$  skonstruowanych z  $n$  monowarstw atomowych Fe(001) i Au(001). Uformowany w ten sposób układ wielowarstwowy  $Fe_1Au_1$  stanowił uporządkowany stop niewystępujący naturalnie. Porównanie z obliczeniami z pierwszych zasad wskazuje na stabilizację struktury uporządkowanej typu  $L1_0$ .

### 2. Dynamika namagnesowania podczas wzrostu nanostruktur Fe na W(110)

Zastosowano jądrowe rezonansowe rozpraszanie promieniowania synchrotronowego do badania ewolucji właściwości chemicznych, strukturalnych i magnetycznych w trakcie wzrostu warstw. Metoda mogła być zastosowana dla pojedynczych warstw atomowych, co stanowi o jej unikalności. W szczególności, wykorzystując specyficzne cechy metody, przebadano dynamikę reorientacji spinowej w ultracienkich warstwach żelaza w funkcji temperatury, grubości warstwy oraz stanu chemicznego powierzchni.

Oprócz zadań badawczych Instytut realizował w ostatnich dwóch miesiącach projektu zadania związane z jego zakończeniem, do których należały:

1. Przygotowanie raportów: rocznego i końcowego z realizacji zadań w projekcie, oraz analogicznych raportów z zarządzania projektem.
2. Przygotowanie i udział merytoryczny w końcowych warsztatach projektu zatytułowanych "Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism" odbywających się w ESRF Grenoble, Feb. 6-8, 2007 in ESRF Grenoble, France

Projekt Dynasync został w pełni zrealizowany w zaplanowanym terminie. Wykonano 35 szczegółowych zadań (deliverables), opublikowano kilkadziesiąt prac naukowych, a kilkadziesiąt kolejnych przygotowywanych jest do publikacji, wygłoszono lub zaprezentowano ponad 120 prac konferencyjnych. Projekt przyczynił się do znacznego poszerzenia Europejskiej Przestrzeni Badawczej dając do dyspozycji międzynarodowej społeczności naukowej unikalne i sprawdzone urządzenia badawcze w kilku ośrodkach naukowych. Projekt został przyjęty przez Komisję Europejską bez zastrzeżeń, zarówno pod względem merytorycznym i finansowym.

## 2. Scientific Network – Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practise



Projekt EU 6<sup>th</sup> FP INCO-CT-2003-003355 SURUZ  
(SSA koordynacja) [2004-2007]  
(koordynator projektu: prof. Kazimierz Małyśa)

Podstawowym celem projektu „SURUZ” było rozwinięcie współpracy naukowej pomiędzy jednostkami naukowymi w Polsce, zajmujących się różnymi aspektami badań nad substancjami powierzchniowo aktywnymi i układami zdyspergowanymi. W realizacji projektu „SURUZ” uczestniczyły 24 zespoły z 14 instytucji naukowych w całej Polsce. Projekt był koordynowany przez IKiFP PAN i posiada specjalną, na bieżąco uaktualnianą stronę internetową: [www.cyf-kr.edu.pl/~ncmalysa/](http://www.cyf-kr.edu.pl/~ncmalysa/) na serwerze IKiFP PAN.

W czasie trzeciego, ostatniego roku realizacji projektu zespoły badawcze kontynuowały realizację zadań i aktywność poprzez wzajemne kontakty i współpracę, wymianę osobową, uczestnictwo w konferencjach Sieci, oraz w warsztatach dla młodych naukowców. Podczas trwania ostatniego etapu projektu 110 naukowców wyjechało i zapoznało się z laboratoriami i aparaturą dostępną w instytucjach Partnerów Sieci „SURUZ” oraz wykonało w nich eksperymenty. Na seminariach, w różnych jednostkach naukowych sieci SURUZ, wygłoszonych zostało 6 wykładów, przez wizytujących je naukowców. Całkowita liczba pracowników oraz doktorantów odwiedzających laboratoria instytucji partnerskich, biorących udział w warsztatach, konferencjach oraz spotkaniach klasterowych, organizowanych bądź współorganizowanych przez Sieć „SURUZ”, wyniosła ponad 390.

Dwie główne konferencje naukowe zostały zorganizowane dzięki finansowemu wsparciu projektu. Duża konferencja Sieci „SURUZ” (117 uczestników) została zorganizowana w Książu w dniach 22-24 maja 2007, gdzie wygłoszono 35 wykładów i zaprezentowano 80 posterów. Druga główna konferencja: „XI International Conference of Mineral Processing” połączona z „XLIII Symposium on Physicochemical Problems of Mineral Processing” (68 uczestników) miała miejsce w Zakopanym w dniach 18 do 21 września 2006 roku. Ponadto zorganizowano Mikrosymposium „SURUZ” w ramach V Kongresu Technologii Chemicznej w Poznaniu, 11-15 września 2006 oraz Ogólnopolska Konferencja Gospodarka Osadami „OSAD 2006” (150 uczestników) w Gdańsku, 25–28 września.

W ramach projektu zostało także zorganizowane pięć warsztatów i spotkań dla młodych naukowców. „Pro-ecological aspects of surfactant research” w Sarbinowie, 20-22 września, 2006, (11 uczestników), „Electrokinetic Phenomena in Dispersed Systems w Lublinie, 24-25, stycznia 2007 (21 uczestników). Warsztaty SURUZ „*Surfactants and Dispersed System*” w ramach spotkania COST D43: „*Functional Interfaces – Theory and Experiment*” organizowane w Krakowie przez Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN (ICSC), 19-21 marca, 2007 (59 uczestników) oraz Warsztaty „Wetting and Surface Modification” organizowane w miejscowości Sudomie, 15-21 czerwca, 2007 (34 uczestników)

W trakcie trwania projektu SURUZ „Scientific Network – Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practise” zapoczątkowano kilka nowych tematów, zrealizowano również kilka wspólnych zadań badawczych, co zaowocowało 22 wspólnymi publikacjami, których większość została opublikowana (albo przyjęta) do druku w renomowanych czasopismach o cyrkulacji światowej oraz wieloma wspólnymi wystąpieniami konferencyjnymi. Kilka publikacji jest w przygotowaniu. Szczególnie optymistyczne i rokujące na przyszłość są bliskie kontakty, dyskusje i współpraca pomiędzy młodymi naukowcami i doktorantami.

### 3. Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts



Projekt EU 6th FP MTKDCT-2004-509832 TOK-CATA

(ToK koordynacja) [2004-2008]

(koordynator projektu: prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska)

TOK-CATA jest projektem typu “transfer wiedzy”, w którym IkiFP PAN jest instytucją koordynującą wymianę naukową i prace badawcze, a partnerami w projekcie są University of Nottingham (Wielka Brytania), Consejo Superior de Investigaciones Cientificas (Hiszpania), Stuttgart Universität (Niemcy), Humboldt Universität (Niemcy), Lunds Universitet (Szwecja). Program badawczy jest realizowany w IkiFP PAN przez wybranych w drodze konkursu zagranicznych specjalistów oraz w instytucjach partnerskich przez stypendystów z IkiFP PAN. Głównym celem projektu są badania związane z projektowaniem i syntezą porowatych katalizatorów o kontrolowanych właściwościach. Wyróżnić można trzy zasadnicze kierunki badawcze:

- projektowanie, syntezę i optymalizację materiałów porowatych opartych na zeolitach, modyfikowanych krzemianach warstwowych i uporządkowanych mezoporowatych krzemionkach
- kontrola tekstury katalizatora, morfologii ziaren i wbudowania centrów aktywnych pod kątem zastosowania do syntezy wysoko przetworzonych związków i w katalizie środowiskowej
- tworzenie podstaw do wykorzystania wyników modelowania teoretycznego jako przesłanki w projektowaniu katalizatorów.

Wybrane tematy badawcze to m.in:

- Mezoporowate krzemionki o kontrolowanej morfologii
- Porowate heterostrukтуры na osnowie minerałów ilastych
- Membrany zeolitowe i mikroreaktory membranowe
- Nanoporowate materiały węglowe
- Zastosowanie zaawansowanych technik NMR do badania struktur zeolitycznych
- Procesy alkilacji i izomeryzacji na katalizatorach zeolitycznych
- Selekttywne uwodornienie nienasyconych węglowodorów na immobilizowanych katalizatorach homogenicznych
- Modelowanie teoretyczne centrów metali przejściowych w enzymach
- Modelowanie teoretyczne powierzchni  $\text{SiO}_2$

W 2007 roku wynikiem projektu było 5 opublikowanych prac, 1 praca w druku, 13 wystąpień konferencyjnych, w tym 1 wykład, 4 prezentacje ustne i 8 posterowych. Przykłady szczególnie interesujących wyników uzyskanych w minionym roku to:

- otrzymanie porowatego grafityzowanego węgla o zwiększonej i odwracalnej pojemności sorpcyjnej wodoru poprzez wykorzystanie zeolitu  $\beta$  jako templaty i metody CVD (chemical vapour deposition) jako techniki nanoszenia prekursora węglowego
- wykazanie, że porowate heterostrukтуры na osnowie minerałów ilastych mogą być skutecznie aluminowane, co poprawia ich właściwości jonowymiennie i umożliwia wykorzystanie jako nośników organometalicznych
- otrzymanie, z wykorzystaniem metody samoorganizacji, kompozytów silikalit-I/ZSM-5 o kontrolowanej budowie, w których duże kryształy ZSM-5 pokryte zostały cienką polikrystaliczną warstwą silikalitu-I, o indywidualnych kryształach zorientowanych płaszczyzną (010) równolegle do ścian dużych kryształów ZSM-5.



#### 4. Annual Polish Conferences Are Setting up a New Platform for Dissemination of Knowledge in the Field of Catalysis”

Projekt EU 6<sup>th</sup> FP NMP3-CT-2004-510318 POL-CAT (SSA koordynacja) [2004-2007]  
(koordynator projektu: prof. Bogdan Sulikowski)

W Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN wykonano trzyletni projekt Unii Europejskiej POL-CAT. Projekt został zrealizowany w okresie od 1.03.2004 do 28.02.2007 r., poprzez zorganizowanie trzech krajowych konferencji naukowych w zakresie katalizy w latach 2004, 2005 i 2006.

W dniach 17-19 marca 2004 zorganizowano 36. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, czyli pierwszą z zaplanowanych konferencji. W konferencji wzięło udział 186 zarejestrowanych uczestników, a program obejmował:

- 5 wykładów plenarnych
- 20 komunikatów ustnych
- 2 sesje posterowe (ogółem 186 prezentacji posterowych).

Zredagowano i wydano tom pt. „Materiały XXXVI Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, Kraków, 17-19 marca 2004” (ISBN 83-907325-8-0, 350 stron formatu A-4).

W dniach 15-18 marca 2005 zorganizowano 37. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne. W konferencji wzięło udział 240 zarejestrowanych uczestników, a program obejmował:

- 8 wykładów plenarnych
- 1 wykład na zaproszenie (Key-note Lecture)
- 23 prezentacje ustne
- 2 sesje posterowe (ogółem 194 prezentacji posterowych)
- ponadto wysoki urzędnik UE, p. Soren Bowadt, który prowadził projekt POL-CAT, przedstawił wykład specjalny pt. ”Opportunities for Research within the NMP priority of FP6”.

Zredagowano i wydano tom pt. „Materiały XXXVII Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, Kraków, 15-18 marca 2005” (ISBN 83-920331-2-4, 394 strony formatu A-4).

W dniach 15-18 marca 2006 zorganizowano 38 Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne. W konferencji wzięło udział 241 zarejestrowanych uczestników, a program obejmował:

- 4 wykłady plenarne gości zagranicznych
- 6 wykładów plenarnych polskich mówców
- 7 wykładów na zaproszenie
- 8 prezentacji ustnych typu *flash oral*
- ponadto zorganizowano 2 sesje posterowe (205 posterów).

Wydano tom pt. „Materiały XXXVIII Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, Kraków, 15-18 marca 2006”, (ISBN 83-60514-00-3, 406 stron formatu A-4).

W 2005 roku ukazał się zeszyt specjalny *Catalysis Today* ”Oxide-Based Materials in Catalysis”, vol. 101, zeszyt (2), str. 51-184, 30 marca 2005 (ISSN 0920-5861). Guest Editor: B. Sulikowski. W 2006 roku ukazał się zeszyt specjalny *Catalysis Today* ”Nano-Structured Materials for Catalysis”, vol. 114, zeszyt (2-3), str. 125-332, 15 maja 2006 (ISSN 0920-5861). Guest Editor: B. Sulikowski.

## 5. Nanocapsules for Targeted Controlled Delivery of Chemicals

### Optimization of Microcapsule Shells



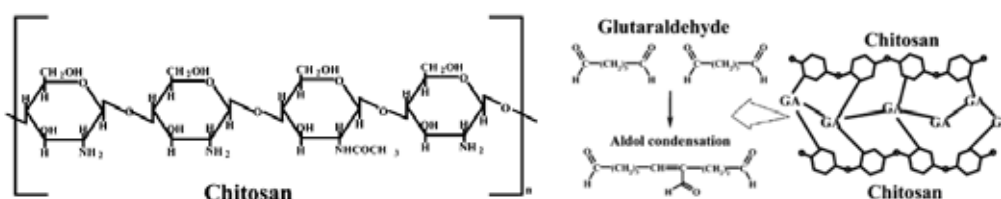
Projekt badawczy EU 6<sup>th</sup> FP NMP4-CT-2003-001428 NANOCAPS (STREP) [2004-2007]  
(kierownik projektu: doc. Piotr Warszyński)

Głównym celem projektu “NANOCAPS” było rozwinięcie nowych technologii opartych na mikro-enkapsulacji, mających na celu rozwiązanie problemów kontrolowanego transportu i uwalniania związków aktywnych poprzez wytworzenie nowych nano-materiałów oraz pokryć nano-kompozytowych, dla redukcji kosztów produkcji nano-kapsulek poprzez zastosowanie zdobytej wiedzy dla użycia mikrokapsulek w zastosowaniach: biomedycznych (środki antyalergiczne, biostatyczne) oraz przy wytwarzaniu samo-reperujących się pokryć metalowych.

Metodą elipsometryczną określono zależność grubości filmów polielektrolitowych tworzonych za pomocą sekwencyjnej adsorpcji pary polikation PEI-polianion PSS. Do tej pory PEI był używany do formowania warstwy zakotwiczonej dla innych filmów polielektrolitowych n.p. PAH/PSS, chitosan/algina. Stwierdzono niemonotoniczny, oscylacyjny wzrost grubości filmu wraz z liczbą nakładanych warstw. Wyraźnie grubsze filmy były obserwowane w przypadku osadzania polianionu jako ostatniej warstwy. Może być to spowodowane częściową desorpcją warstwy polianionowej przy nakładaniu kolejnej warstwy polikationowej. Jednakże prowadzone równoległe badania zwilżalności warstw nie potwierdziły tej hipotezy. Obserwowano bardzo regularne oscylacje kąta zwilżania przy kolejnych warstwach polikationowych i polianionowych. Alternatywnym wyjaśnieniem niemonotonicznego wzrostu grubości mogą być zmiany strukturalne wewnątrz filmu.

Podobny niemonotoniczny wzrost grubości filmu wielowarstwowego zaobserwowano przy tworzeniu go z polielektrolitów słabych (PAH/PAA) w warunkach, gdy nakładane polielektrolity były słabo naładowane t.j. pH=11 dla PAH i pH=3 dla PAA. Jednakże w tym przypadku zaobserwowano tworzenie kompleksów polielektrolitów we wnętrzu roztworu po nałożeniu kolejnych warstw. Niski stopień naładowania w tych warunkach powoduje, że adsorpcja polielektrolitu w takich warunkach może być odwracalna.

Wcześniej prowadzone eksperymenty pokazały, że warstwy chitosanowe filmów polielektrolitowych są niestabilne. Dokonano próby ich stabilizacji poprzez sieciowanie chitosanu wg następującej reakcji:



Za pomocą pomiarów elektrokinetycznych stwierdzono wzrost stabilności warstw chitosanowych, jednakże kosztem ich stopnia naładowania. Grubości warstw o różnym stopniu usieciowania, wyznaczone metodą elipsometryczną były podobne.

Przeprowadzone zostały testy adhezji kapsulek Bio-allergoff o rozkładzie bimodalnym na powierzchniach biomimetycznych. Powierzchnie te były uzyskane poprzez adsorpcję chitosanu (pojedynczej warstwy) na powierzchni krzemowej. Stwierdzono, że w przypadku maksymalnego pokrycia powierzchni około 10% jest pokryte mikrokapsułkami ( $d=2\mu\text{m}$ ). Pozostała powierzchnia jest pokryta nanokapsułkami ( $d=50\text{ nm}$ ), które blokują dalszą adsorpcję mikrokapsulek.

## 6. Global Climate Change Impact on Built Heritage and Cultural Landscapes

Projekt badawczy EU 6<sup>th</sup> FP SSP1-CT-2003-501837 NOAH'S ARK (STREP) [2004-2007]

(kierownik projektu: doc. Roman Kozłowski)



Celem projektu Noah's Ark było określenie parametrów i zmian meteorologicznych, które w sposób krytyczny w okresie najbliższych 100 lat wpłyną na materialne środowisko zabytkowe, oraz opracowanie i upowszechnienie strategii ograniczania pojawiających się zagrożeń. Strategie te zostaną wykorzystane przez szeroko rozumiane środowisko administratorów i opiekunów zabytków. Zadania grupy badawczej instytutu skupiły się na opracowaniu wskaźników zagrożeń historycznych materiałów wrażliwych na oddziaływanie wilgoci i temperatury, takich jak drewno lub piaskowce o spoiwie ilastym, które opisały względny wpływ klimatu na postęp zniszczeń w tych materiałach.

Zadania realizowane przez instytut w okresie sprawozdawczym obejmującym pięć ostatnich miesięcy trwania projektu miały na celu upowszechnianie wyników projektu wśród przedstawicieli władz administracyjnych i środowisk konserwatorskich, odpowiedzialnych za ochronę zbiorów muzealnych i obiektów zabytkowych w Europie. Działania te objęły:

- końcową redakcję i publikację atlasu zawierającego mapy zmian parametrów klimatycznych istotnych dla ochrony materiałów i obiektów zabytkowych, mapy zagrożeń tych materiałów przez zmiany klimatu, omówienie zagrożeń wynikających z nasilenia ekstremalnych zjawisk klimatycznych, jak nawałnicowe deszcze, powodzie lub osuwanie się gruntów
- końcową redakcję i publikację wytycznych zawierających strategie zapobiegania zagrożeniom związanym ze zmianami klimatu, adresowanych do opiekunów europejskiego dziedzictwa kultury - właścicieli i opiekunów zabytków oraz władz konserwatorskich, administracyjnych i legislacyjnych
- udział w organizacji dwudniowego międzynarodowego warsztatu w Londynie w dniach 18-19 stycznia 2007 na temat: „Zagrożenia zmianami klimatu: atlas i wskazówki dla ochrony dziedzictwa kultury”. W warsztacie uczestniczyło 70 specjalistów z 16 krajów
- udział w organizacji międzynarodowego warsztatu w Rzymie w dniu 30 maja 2007 na temat: „Zmiany klimatu a ochrona dziedzictwa kultury w Europie: badania, zagrożenia i strategia polityczna”. W warsztacie uczestniczyło 70 specjalistów i polityków. Część spotkania stanowiła dyskusja panelowa z udziałem 3 członków Parlamentu Europejskiego i przedstawicieli Komisji Europejskiej

## 7. ERA-NET for Applied Catalysis in Europe



Projekt EU 6<sup>th</sup> FP ERAC 011784 ACENET (CA) [2004-2008]

(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Projekt ACENET jest projektem typu ERA-NET, finansowanym ze środków 6. Programu Ramowego Unii Europejskiej, mającym na celu współpracę i koordynację działań związanych z badaniami podejmowanymi na poziomie krajowym i regionalnym w krajach członkowskich UE i stowarzyszonych. Projekty takie pozwalają na tworzenie sieci współpracy i otwieranie swoich programów badawczych dla innych krajów. Współpraca w tym zakresie prowadzona jest przez ministerstwa, organizacje finansujące badania naukowe, instytuty badawcze oraz organizacje zarządzające badaniami naukowymi, ze szczególnym naciskiem na wypełnianie luki pomiędzy badaniami prowadzonymi na poziomie akademickim i przemysłowym. W projekcie bierze udział 12 partnerów z 10 krajów: Netherlands Organisation for Scientific Research, The Netherlands; Bundesministerium für Bildung und Forschung, Germany; Centre National de la Recherche Scientifique, France; Fundação para a Ciência e a Tecnologia, Portugal; Ministero dell'Istruzione della Università e della Ricerca and Consorzio Reattivity e Catalisi, Italy; General Secretariat for Research & Technology, Ministry of Development, Greece; Ministerio de Educación y Tecnología, Spain; Forschungszentrum Jülich GmbH, Germany; Engineering and Physical Sciences Research Council, UK; Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego, Polska; Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, Polska and The Irish Research Council for Science, Engineering and Technology, Irland. W ramach projektu ERA NET ACENET, po około 2,5 letnim procesie przygotowawczym został ogłoszony konkurs na projekty badawcze, który jest przeprowadzany w oparciu o wspólnie wypracowane i uzgodnione procedury. Temat konkursu: „Zrównoważone, innowacyjne procesy katalityczne z lepszym wykorzystaniem energii i węgla” koncentruje się wokół zagadnień kluczowych dla przyszłego, zrównoważonego rozwoju ekonomicznego i został sformułowany w taki sposób, aby szeroko uwzględnić obszary priorytetowe zdefiniowane w strategicznej agendzie badawczej europejskiej Platformy Technologicznej Zrównoważonej Chemii, oraz cele uznane za kluczowe w długofalowych założeniach polityk naukowych poszczególnych państw – Partnerów Projektu.

Wspólny konkurs na projekty badawcze w ramach ERA NET ACENET jest otwarty dla podmiotów spełniających narodowe i europejskie kryteria uczestnictwa z tych państw – Partnerów Projektu, które zadeklarowały gotowość finansowania grup badawczych ze swoich krajów, pod warunkiem uzyskania pozytywnej oceny złożonego projektu.

Głównym celem wspólnego konkursu na projekty badawcze w ramach ERA NET ACENET jest stymulowanie europejskiego publiczno-prywatnego partnerstwa w ramach wspólnie prowadzonych badań w dziedzinie katalizy stosowanej. Ma to prowadzić do zacieśnienia współpracy podmiotów zlokalizowanych w różnych krajach w aspektach kluczowych dla rozwoju nauki i technologii w celu wykreowania ambitnych, ponadnarodowych projektów badawczych, nastawionych na wdrożenie uzyskanych wyników.

Ponadto, w ramach projektu został stworzony Wspólny Program Szkoleń i Edukacji, którego elementami są: Zintegrowany Kurs Katalizy, Szkoła Katalizy, kursy Ustawicznego Szkolenia Zawodowego oraz Edukacyjne Centrum Doskonałości. W 2007 r. odbył się Zintegrowany Kurs Katalizy w Krakowie, kurs Ustawicznego Szkolenia Zawodowego w Bath oraz Szkoła Katalizy w Bari.

## 8. Integrated Design of Catalytic Nanomaterials for a Sustainable Production



Projekt EU 6<sup>th</sup> FP NMP2-011730-2 IDECAT (NoE) [2005-2009]  
(kierownik projektu: prof. Małgorzata Witko)

Projekt IDECAT jest Siecią Doskonałości powstałą w 2005 r., finansowaną ze środków 6. Programu Ramowego Unii Europejskiej. Sieć jest koordynowana przez Departament Chemii Przemysłowej i Inżynierii Materiałowej Uniwersytetu w Mesynie we Włoszech i skupia 37 laboratoriów z 17 instytucji: Consorzio Interuniversitario per la Scienza e Tecnologia dei Materiali, Włochy; Ghent University, Belgia; Katholieke University Leuven, Belgia; J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Czechy; Helsinki University of Technology, Finlandia; Centre Nationale de la Recherche Scientifique, Francja; Max-Planck-Gesellschaft, Niemcy; Leibnitz Institute of Organic Catalysis, Niemcy; Technische University Munchen, Niemcy; Consiglio Nazionale delle Ricerche, Włochy; NRSC-Catalysis, Holandia; Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni, Polska; Consejo Superior de Investigaciones Cientificas, Hiszpania; Stockholm University, Szwecja; University St. Andrews, Anglia; University of Southampton, Anglia; Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Szwajcaria. Celem sieci jest integracja środowisk naukowych zajmujących się zagadnieniami katalizy homogenicznej, heterogenicznej i biokatalizy poprzez stworzenie ram dla badań, edukacji, promocji nauki, rozprzestrzeniania wiedzy i transferu technologii, w związku z czym, projekt podzielony został na 5 grup zadań: Wspólny Program Integracji, Wspólny Program Badań, Wspólny Program Rozpowszechniania Wiedzy, Wspólny Program Transferu Wiedzy i Technologii oraz Zarządzanie, w ramach których funkcjonuje 13 Pakietów Zadań.

Osiągnięciu trwałej integracji ma służyć powstanie wirtualnego Europejskiego Instytutu Badawczego w dziedzinie Katalizy (ERIC), który będzie stowarzyszeniem skupiającym europejskie instytucje, zarówno publiczne, jak i prywatne, w tym małe i średnie przedsiębiorstwa i duże firmy przemysłowe działające w tej dziedzinie i zajmujące się zarówno prowadzeniem badań, jak i praktycznymi wdrożeniami.

Rok 2007 był czasem intensywnych prac nad stworzeniem dokumentów prawnych regulujących zasady funkcjonowania w/w wirtualnego Instytutu, tj. Statutu i Wewnętrznych Regulacji oraz Porozumienia Ramowego, tj. specjalnych zasad współpracy pomiędzy Instytutem a tymi partnerami sieci IDECAT, którzy nie utworzą wspólnej formy prawnej. Udoskonalono również narzędzia internetowe mające służyć bardziej efektywnemu przepływowi informacji w ramach sieci oraz kontynuowano działania na rzecz większej aktywizacji kobiet w nauce.

W ramach Wspólnego Programu badań kontynuowano prace w ramach wszystkich czterech wyodrębnionych zadań badawczych, tj.: 1) tworzenie i udoskonalenie nanoobjektów oraz nanoorganizacja, 2) tworzenie i projektowanie nowych wielofunkcyjnych, nanostrukturalnych materiałów, 3) wypełnianie luki w multidyscyplinarnych strategiach badawczych, 4) procesy ochrony środowiska i zrównoważona energia i produkcja. Działalność w zakresie niniejszego Programu prowadzone była we współpracy z innymi uczestnikami sieci.

W ramach programu poświęconemu rozpowszechnianiu wiedzy, Instytut Katalizy aktywnie brał udział w organizowanym w Krakowie Festiwalu Nauki oraz zorganizował Dzień Otwarty dla promocji nauki wśród młodego pokolenia. Ponadto pracownicy i doktoranci Instytutu aktywnie uczestniczyli w konferencjach i seminariach organizowanych w ramach sieci, w tym w Zintegrowanym Kursie Katalizy Stosowanej zorganizowanym w IFiFP PAN w Krakowie.

W ramach programu Transferu Wiedzy i Technologii powstało Biuro Współpracy z Przemysłem, które zorganizowało 2 spotkania Rady Przemysłowej, których wynikiem był o przygotowanie dwóch dużych projektów badawczych, z aktywnym udziałem przemysłu. Instytut Katalizy aktywnie uczestniczył w pracach wszystkich grup zadaniowych sieci

## 9. Sensor System for Detection of Harmful Environments for Pipe Organ



EC 6<sup>th</sup> FP SSP-4 SSPI-CT-2004-022695 SENSORGAN (STREP) [2006-2008]

*(kierownik projektu: dr Łukasz Bratasz)*

Mijający rok był drugim z trzech lat zaplanowanych na realizację projektu poświęconego opracowaniu systemu czujników do wykrywania szkodliwych warunków dla instrumentów organowych. Główne zadania badawcze instytutu w omawianym projekcie są podzielone na pakiety, z czego prace nad dwoma pierwszymi rozpoczęły się już w roku 2006.

Pierwszy z nich ma na celu stworzenie prostego i ekonomicznego czujnika emisji akustycznej (EA) dającego możliwość monitorowania pękania drewnianych części instrumentów organowych i innych drewnianych dzieł sztuki. Badania rozpoczęte w roku ubiegłym nad adaptacją metody pomiaru EA do specyfiki dziedziny ochrony obiektów zabytkowych, a w szczególności instrumentów organowych, doprowadziły do określenia grupy krytycznych parametrów pozwalających identyfikować i śledzić pęknięcie obiektów drewnianych niezależnie od zakłóceń powstających w ich otoczeniu. Należą do nich charakterystyczne pasmo częstotliwości zdarzenia EA i zakłóceń środowiska, energia zdarzenia EA, korelacja zdarzeń w paśmie charakterystycznym jak niższym od niego. Określenie tych parametrów umożliwiło zbudowanie prototypu czujnika EA, który posiadał cechy konieczne do jego komercjalizacji. Wysiłki zespołu skierowane były na maksymalne uproszczenie układów elektronicznych i obsługi. Położono szczególny nacisk także skonfigurowanie komunikacji, które dałoby możliwość maksymalnie szerokiego wykorzystania czujnika EA zarówno w muzeach jak i pomiarach terenowych również przez personel nieposiadający pełnych kwalifikacji badawczych. Prace te zaowocowały podpisaniem przez Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN umowy licencyjnej z firmą Hanwell Instruments Ltd z Wielkiej Brytanii będącą światowym liderem produkującym sprzęt do monitorowania warunków przechowywania obiektów zabytkowych.

W pakiecie drugim instytut jest odpowiedzialny za pomiar i analizę sytuacji mikroklimatycznej w obiekcie referencyjnym – zabytkowym kościele w Olkuszu. Pomiaru takie są wykonywane w sposób ciągły, co przy synchronizacji z pomiarami EA pozwoliło na bardzo dobrą identyfikację fluktuacji mikroklimatycznych powodujących epizody pęknięcia drewnianych elementów zabytkowych organów znajdujących się w tym kościele.

## 10. Multifunctional Particulate System for Nanomedicine

EC 6<sup>th</sup> FP ERA-NET MATERA DWM/229/MATERA/2006 [2006-2010] NANMEDRART [2007-2010]

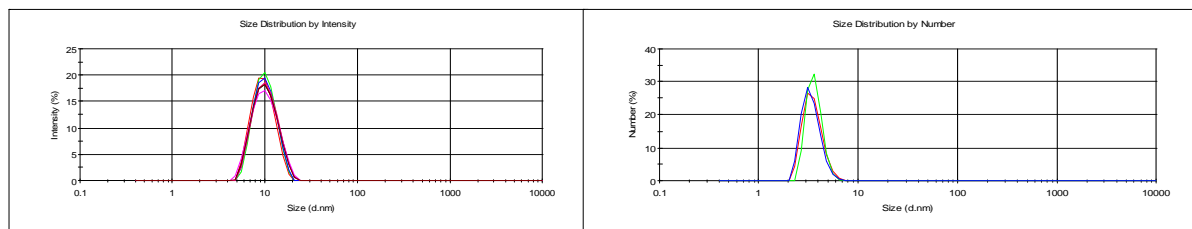
(kierownik projektu: doc Piotr Warszński)

Celem niniejszego projektu jest opracowanie podstaw naukowych nowych technologii wytwarzania nanocząstek organicznych, nieorganicznych metalicznych lub kompozytowych do późniejszego zastosowania ich jako rdzeni mikrokapsulek do kontrolowanego transportu substancji leczniczych (antybakteryjnych, antywirusowych i antybakteryjnych) lub jako nośników dla rozpoznawania molekularnego (molecular sensing).

Projekt jest realizowany przy współpracy SINTEF Materials and Chemistry Oslo, Hebrew University Jerusalem, Institute for Cancer Research at the Norwegian Radium Hospital Oslo i Politechniką Wrocławską - Wydział Chemiczny. Jednym z naszych zadań w projekcie jest opracowanie technik otrzymywania nanocząstek i nanokapsulek (zakresie 20-50nm) zawierających aktywne związki z powłokami przystosowanymi do terapii rakowych i antybakteryjnych.

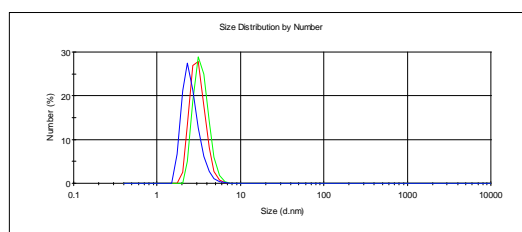
W 2007 roku skupiliśmy się na preparatyce kapsulek zawierających barwniki fluorescencyjne metoda mikroemulsyfikacji. Kapsułki te będą użyte w dalszej części projektu jako markery do badania penetracji błon komórkowych przez nanocząstki. Przygotowaliśmy mikroemulsje zawierające barwnik, rozpuszczalny w oleju- (Kumaryne), w dekanie lub oktanie stabilizowane Tweenem 80 i butanolem jako kosurfaktantem. Otrzymano emulsje ze średnim rozmiarem kropelek 10nm. Dla barwnika (Rodamina B) rozpuszczalnego w wodzie otrzymano mikroemulsje woda w oleju (toluen, decan, oktan, cykloheksan) stabilizowane AOT. Średni rozmiar kropelek był 4nm. Przykładowe rozkłady wielkości przedstawiono na Rys. 1

a) b)



Rys.1 Rozkład wielkości kropelek mikroemulsyjnych a) cykloheksan/T80/woda b) woda/AOT/oktan

Ponieważ antybakteryjne i antygrzybicze właściwości nanocząstek srebra są dobrze udokumentowane w literaturze skupiliśmy się na opracowaniu różnych metod otrzymywania takich nanocząstek metodami redukcji jonów srebra. Do redukcji kompleksu jonów srebra z amoniakiem użyto hydrazyny, kwasu askorbinowego lub formaliny. Przykładowy rozkład wielkości nanocząstek srebra otrzymanych przez redukcję formaldehydem przedstawiono na rysunku 2, otrzymano bimodalny rozkład wielkości, średnia wielkość 4nm z małą frakcją cząstek o rozmiarze 50nm.



Rys.2 Rozkład wielkości nanocząstek srebra uzyskanych poprzez redukcję jonów srebra formaldehydem

## **PROJEKTY EU COST ACTION**





## 2. Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology

Projekt badawczy EU COST Action D43 [2006-2011]

(*representant Polski: prof. Zbigniew Adamczyk*)

Osadzanie cząstek koloidalnych i biocząstek na powierzchniach międzyfazowych ciała stałe/elektrolit ma istotne znaczenie dla określenia mechanizmów i kinetyki wielu procesów takich jak: samoorganizacja, filtracja, separacja, chromatografia, testy immunologiczne, tworzenie zakrzepów i osadów w przeszczepach i sztucznych organach, itp. Z praktycznego punktu widzenia szczególnie interesującym wydaje się problem osadzania cząstek, w szczególności białek, na powierzchniach mających określoną, regularną strukturę (np. pasmową). Wzrastające zainteresowanie tymi materiałami wiąże się z ich dużym znaczeniem jako tzw. inteligentnych powierzchni (superhydrofobowe, antyrefleksyjne, samoczyszczące), które mogą być też zastosowane jako biosensory, wąskopasmowe filtry optyczne, kryształy fotoniczne oraz przy konstrukcji urządzeń mikroelektronicznych i mikroprzepływowych. Pomimo istotnego znaczenia dla praktyki i nauk podstawowych, zagadnienie osadzania cząstek na powierzchniach heterogenicznych, posiadających określoną strukturę nie było analizowane w sposób systematyczny. Tak więc, głównym celem niniejszego projektu badawczego było opracowanie efektywnych metod opisu teoretycznego i doświadczalnego zjawisk adsorpcji i osadzania cząstek na powierzchniach granicznych, tworzących struktury mono- i wielowarstwowe o określonej architekturze. Pierwszym etapem realizacji projektu była praca przeglądowa (umieszczona jako rozdział w monografii), dotycząca szerokiej klasy zjawisk transportu i osadzania cząstek na powierzchniach heterogenicznych. Omówiono w niej różne modele teoretyczne oparte na koncepcji tzw. randomalnej, sekwencyjnej adsorpcji (RSA) oraz rozwiązania analityczne, wynikające z zastosowania równowagowego modelu cieczy dwuwymiarowej. Wyróżniono trzy główne przypadki osadzania cząstek na podstawie stosunku rozmiarów cząstek do rozmiarów centrum adsorpcji. Szczególną uwagę zwrócono na omówienie zakresu porównywalnych wielkości cząstek i centrów adsorpcji przedstawiając wyniki teoretyczne, opisujące topologię monowarstw cząstek, pokrycia maksymalne, dwu- i trójwymiarowe rozkłady gęstości pokrycia, szorstkość powierzchni i inne parametry. Omówiono zjawiska osadzania cząstek na strukturach powierzchniowych w postaci kropek kwantowych i nanodrutów (pasków). Przedstawiono też graniczne wyniki analityczne, uzyskane dla linii o skończonej długości (odcinków). Te wyniki teoretyczne zostały wykorzystane do interpretacji pomiarów doświadczalnych uzyskanych dla monodispersyjnych suspensji nanocząstek (głównie lateksów polistyrenowych) adsorbowanych na powierzchniach o określonej strukturze, wytwarzanych zazwyczaj przez nanolitografię, a następnie multiwarstwową adsorpcję polielektrolitów. Struktura tworzonych warstewek cząstek była analizowana przy użyciu funkcji korelacyjnych rozkładu, jak również rozkład gęstości pokrycia oraz pokrycia maksymalne, w zależności od stosunku wielkości cząstek do rozmiarów struktur powierzchniowych. Wykazano, że wyniki teoretyczne uzyskane przy zastosowaniu modelu RSA dobrze opisują wyniki doświadczalne dla szerokiego zakresu rozmiarów cząstek i gęstości pokrycia. Fakt ten ma istotne znaczenie poznawcze, gdyż umożliwia jednoznaczne określenie rozmiarów i kształtu nanostruktur powierzchniowych, niewidocznych pod mikroskopem optycznym, przy użyciu metodyk odwzorowania koloidalnego. Ponadto wykazano też, że wyniki uzyskane dla modelowych układów koloidalnych mogą być wykorzystane do interpretacji zjawisk adsorpcji biocząstek, w szczególności białek.

### **3. Wood Science for Conservation of Cultural Heritage**

Projekt badawczy EU COST Action IE0601 [2006-2011]

*(representant Polski: doc. Roman Kozłowski)*

Akcja rozpoczęła się 18. kwietnia 2007. Planowany czas trwania akcji wynosi cztery lata. Do listopada 2007 24 kraje podpisało porozumienie o realizacji akcji (Memorandum of Understanding) W ramach akcji działalność podjęły trzy grupy robocze: WG1 – Właściwości drewna, WG2 – Ocena i diagnoza, i WG3 – Konserwacja i restauracja. Pracownik instytutu dr Roman Kozłowski, który reprezentuje Polskę w Komitecie Zarządzającym Akcją, został wybrany do ośmioosobowego Komitetu Sterującego i na stanowisko kierującego grupą roboczą 2. Wziął udział we wszystkich czterech posiedzeniach Komitetów Zarządzającego i Sterującego zorganizowanych w 2007, oraz reprezentował Akcję na 5. Spotkaniu Komitetu Domeny COST Materiały, Fizyka i Nanonauki.

W 2007 roku zorganizowano w ramach akcji dwa warsztaty w Tervuren (Belgia) i we Florencji. W trakcie warsztatów pracownicy instytutu zaprezentowali łącznie 3 referaty ustne i 2 postery.

## 4. Physics of Droplets

Projekt badawczy EU COST Action P21 [2006-2010]

(*representant Polski: prof. Kazimierz Małysa*)

Celem projektu COST P21 "Physics of droplets" jest zrozumienie i opis procesów związanych z ruchem i oddziaływaniami z różnymi powierzchniami międzyfazowymi kropelek cieczy i pęcherzyków gazowych, oraz rola cienkich warstw. Tematyka COST P21 jest bezpośrednio związana z problemami badawczymi rozwijanymi w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie. Projekt COST P21 został zatwierdzony 27.07.2006 na okres 4 lat i jest koordynowany przez prof. N.Vandewalle, GRASP, Institut de Physique B5a Sart Tilman, Université de Liège, B-4000 Liège, Belgium. W 2007 roku do konsorcjum realizującego ten projekt dołączył Ian Wark Research Institute of University of South Australia i aktualnie uczestniczy w nim 27 zespołów z różnych instytucji badawczych z 16 krajów europejskich oraz jedna instytucja z Australii.

Z Polski oprócz Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w realizacji projektu biorą także zespoły z Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN oraz Wydziału Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Warszawskiej. Prof. K. Małysa z IKiFP PAN jest polskim przedstawicielem w Management Committee. W 2007 roku odbyły się 2 spotkania Management Committee (MC) i w obu uczestniczył K. Małysa. Third MC meeting odbył się w Granadzie w Hiszpanii w dniu 28.03.2007 r, a fourth MC meeting odbył się w Marne-la-vallée we Francji w dniu 13.11.2007 r. Obydwa spotkaniu poświęcone były omówieniu stanu realizacji projektu i dostępnych środków finansowych na różne działania, zwłaszcza STSM oraz spotkania grup roboczych (WG). Na spotkaniu w Marne-la-Vallée ustalono, że w maju 2008 roku w Capri, Włochy zostanie zorganizowana szkoła letnia (3dni) poświęcona chemii fizycznej kropelek, oraz wspólne spotkanie grup roboczych (1 dzień) i kolejne spotkanie Management Committee (1 dzień). Organizatorem spotkania jest prof. S. Guido z University of Napoli wraz ze współpracownikami.

Zespoły biorące udział w realizacji projektu COST P21 działają w trzech grupach roboczych, tzw. „Working Groups”; WG1: "Formation, transport and manipulation of a droplet", WG2: "Coating and protecting droplets", WG3: "Applications and devices". Pracownicy IKiFP PAN uczestniczą głównie w działalności grupy roboczej WG2. W roku 2007 odbyły się 2 robocze spotkania tej grupy – w Granadzie w dniu 29.03.2007r., oraz w Liege w dniu 12.06.2007 r. Na spotkaniach tych pracownicy Instytutu przedstawili następujące referaty: w Granadzie - J. Zawła, M. Krasowska, K. Małysa, "Influence of the bubble kinetic energy on rupture of liquid films at liquid/gas and liquid/solid interfaces", w Liege - J. Zawła, K. Małysa "Does and how the collision angle can affects kinetics of TPC formation".

W ramach programu COST P21 p. mgr Jan Zawła z IKiFP PAN aplikował i uzyskał finansowanie - grant STSM ( Short-Term Scientific Mission) – na 3-tygodniowy pobyt i badania w Max Planck Institut fur Kolloid- und Grenzflächenforschung (grupa dr R. Miller), Golm/Potsdam, Niemcy. Mgr Jan Zawła wykonał w czasie pobytu w Golm pomiary dynamicznych napięć powierzchniowych roztworów n-octyl-trimethylammonium (OTAB) oraz n-dodecyltrimethylammonium przy pomocy dwóch technik: maksymalnego ciśnienia w pęcherzyku (Maximum Bubble Pressure Tensiometry - MBP) oraz wiszącej kropli (Pendant Drop Technique - PDT). Wykonał pomiary dynamicznych i równowagowych napięć powierzchniowych dla roztworów OTAB i DDTAB w zakresach stężeń  $5 \cdot 10^{-4}$  -  $1 \cdot 10^{-1}$  (OTAB) oraz  $1 \cdot 10^{-5}$  -  $2 \cdot 10^{-2}$  M (DDTAB). Do wyników dopasował izotermę Frumkina i wyznaczył współczynnik dyfuzji dla DDTABr.



**PROJEKTY EUROPEJSKIEGO  
OBSZARU GOSPODARCZEGO**

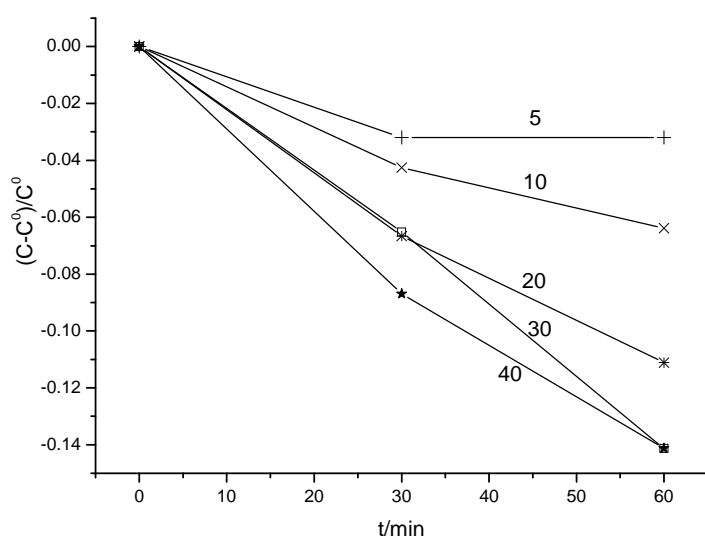


# 1. Effective Photocatalytic-Membrane Methods of Removal of Organic Contaminants for Water Treatment

Projekt badawczy EEA PL0084 NOMRemove [2007-2010]

(kierownik projektu: doc. Piotr Warszzyński)

Przedmiotem projektu jest opracowanie nowej, wysoko efektywnej metodologii procesu oczyszczania wody pitnej z substancji organicznych pochodzenia naturalnego (NOM – natural organic matter). Substancje te, aczkolwiek same w sobie nie stanowią poważnego zagrożenia, sprzyjają rozwojowi bakterii, co stwarza bardzo poważne problemy w instalacjach rozpraszania wody. NOM, zwłaszcza ta ich część, która występuje w postaci roztworów rzeczywistych, są bardzo trudnym do usunięcia zanieczyszczeniem a powstające w trakcie chlorowania wody chlorowcopochodne substancji stanowiących NOM mają właściwości toksyczne. Istotą projektu jest równoczesne zastosowanie czterech metod oczyszczania wody: nanofiltracji, utleniania w wyniku działanie efektu fotokatalitycznego na półprzewodniku, sterylizacji promieniowaniem UV i utleniania chemicznego przez związki uwalniające się z nanokapsulek. Projekt realizowany jest przez konsorcjum naukowe utworzone przez dwóch partnerów: Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie oraz The Foundation for Scientific and Industrial Research at the Norwegian Institute of Technology, SINTEF - Material Science and Chemistry, Oslo, Norwegia. W Instytucie Katalizy w bieżącym roku prowadzono prace nad konstrukcją aparatury do naświetlania roztworów wodnych oraz zawiesin promieniowaniem widzialnym oraz promieniowaniem ultrafioletowym. Skonstruowano i przetestowano system do naświetlania roztworów i zawiesin promieniowaniem widzialnym (system do naświetlania promieniowaniem ultrafioletowym jest w trakcie konstrukcji). Badano efektywność działania fotokatalizatora  $\text{TiO}_2$  (Degusa P25 and P90) w procesie rozkładu dwóch modelowych substancji organicznych (barwnika Rodaminy B oraz handlowego kwasu humusowego) na jego powierzchni pod wpływem promieniowania widzialnego. W przypadku Rodaminy B osiągnano znaczny stopień rozkładu barwnika pod wpływem promieniowania widzialnego, co zobrazowano na rysunku. W przypadku kwasu humusowego efektywność katalizatora w przypadku naświetlania światłem widzialnym okazała się niezadawalająca. Prowadzono również prace nad syntezą nowych fotokatalizatorów  $\text{TiO}_2$  dotowanych nanocząstkami srebra.



Rys. 1. Szybkość rozkładu Rodaminy B w zawiesinie  $\text{TiO}_2$  (Degusa P25) naświetlanej promieniowaniem widzialnym dla różnych stężeń  $\text{TiO}_2$  w zawiesinie. Stężenie początkowe Rodaminy B  $1 \times 10^{-5} \text{ mol dm}^{-3}$ . Liczby przy liniach oznaczają stężenie  $\text{TiO}_2$  w zawiesinie w  $\text{mg dm}^{-3}$ .



## 2. Ustalenie norm dopuszczalnych fluktuacji mikroklimatu dla drewna polichromowanego

Projekt badawczy EEA PL0084 [2007-2010]  
(kierownik projektu: doc. Roman Kozłowski)

Malarstwo tablicowe na drewnie, polichromowana rzeźba drewniana oraz malowidła ściennie dekorujące wnętrza zabytków architektury drewnianej stanowią znaczącą część spuścizny artystycznej. Ochrona tego dziedzictwa jest szczególnie ważna dla Polski i Norwegii, które posiadają unikatowy w skali światowej zespół polichromowanych drewnianych kościołów. Najcenniejsze z nich są wpisane na Listę Dziedzictwa Światowego UNESCO.

Do najpoważniejszych zagrożeń polichromii na drewnie należą niekontrolowane fluktuacje parametrów powietrza w ich otoczeniu, prowadzące do deformacji i uszkodzeń mechanicznych drewna, warstwy zaprawy i powłoki malarskiej. Najgroźniejsze wynikają z wprowadzenia do wnętrza budowli zabytkowych systemów grzewczych niesprzyjających konserwacji. Głównym celem projektu jest precyzyjne i ilościowe ustalenie wielkości fluktuacji parametrów powietrza bezpiecznych dla drewnianych powierzchni polichromowanych. Podstawowym narzędziem badawczym jest bezpośrednie monitorowanie odspojenia warstw dekoracyjnych od drewnianego podłoża i ich uszkodzeń mechanicznych przy zastosowaniu metod optycznych, emisji akustycznej i modelowania komputerowego.

W pierwszych miesiącach trwania projektu zbudowano lub zainstalowano i uruchomiono całą aparaturę badawczą. Zbudowano interferometr płamkowy i przeprowadzono kalibrację jego działania używając drewnianych desek pokrytych warstwą zaprawy, w których na fragmentach podłoża drewnianego naniesiono izolującą warstwę cyklododekanu, osłabiającą adhezję warstwy zaprawy do drewna. Zastosowano z dobrym wynikiem wibrację wzbudzaną dźwiękiem do uwidocznienia na interferogramach odspojonych fragmentów. Jako metodę uzupełniającą, przetestowano kamerę termowizyjną marki FLIR Seria A40, która jest szczególnie przydatna do pracy w rzeczywistych warunkach muzeów lub budowli zabytkowych. Powierzchnia badanych obiektów została nieznacznie podgrzana na okres około 10 s, a przy użyciu kamery określono rozkład temperatury na powierzchni i różne szybkości spadku temperatury charakterystyczne dla fragmentów o nieuszkodzonej i odspojonej warstwie zaprawy.

Przeprowadzono badania deformacji desek wywołanych zmianą wilgotności względnej otoczenia. Jedną płaszczyzną oraz wszystkie boki desek o różnej grubości pokrywano żywicą silikonową, aby wymusić całkowicie asymetryczną dyfuzję pary wodnej z deski i uzyskać w ten sposób możliwie znaczącą deformację. W szeregu testów, obniżano szybko wilgotność względną o zadaną wartość i skanowano wygięcie deski przy zastosowaniu skanera laserowego. Pomiar powtarzano co 5 minut. Uzyskano w ten sposób informację o dynamicznej odpowiedzi desek drewnianych o różnej grubości i asymetrycznej dyfuzji pary wodnej. Uzyskana informacja zostanie wykorzystana w symulacjach komputerowych i w głównym programie badań, w którym zmiany wymiarowe drewna polichromowanego będą symulowane mechanicznie przez ściskanie, rozciąganie, lub zginanie, próbek imitujących obrazy.

## **INNE MIĘDZYNARODOWE PROJEKTY BADAWCZE**



# 1. Enzymes as Nanotools – Development of a New, Enzyme-Based Technology for Engineering Selectively Preamable, Nano-Structured Membranes

Projekt badawczy GDRE Francja 1206/GDR/2007/03 Enzymes as Nanotools [2007-2010]  
(kierownik projektu: doc Piotr Warszyński)

Ze względu na rolę, jaką odgrywają lipazy i fosfolipazy w organizmach żywych i procesach biotechnologicznych, enzymy te są bardzo intensywnie badane. Pomimo to, wiele aspektów ich mechanizmu działania jest niewyjaśnionych. Wynika to po części z trudności analizowania danych eksperymentalnych, co związane jest ze złożonością procesów zachodzących w takich wieloskładnikowych i wielofazowych układach. Konieczne jest również stosowanie różnorodnych technik fizykochemicznych w celu kompleksowego opisu procesów zachodzących z udziałem lipaz i fosfolipaz, a co za tym idzie wymagany jest udział wielu grup badawczych, specjalizujących się w konkretnych technikach eksperymentalnych. Projekt GDRE „Enzymes as nanotools – Development of a new, enzyme based technology for engineering selectively permeable, nanostructured membranes” jest realizowany przez konsorcjum utworzone przez pięć francuskich i cztery polskie grupy badawcze. Przedmiotem projektu jest uzyskanie nowych rezultatów badawczych i kumulacja wiedzy, pozwalającej na zastosowanie enzymów jako „nanonarzędzi” do wytwarzania nowych materiałów. Jego celem jest zbadanie możliwości wykorzystania enzymów jako narzędzi w inżynierii nanostrukturalnych powierzchni dla zastosowań bioelektronicznych i sensorowych, oraz opracowanie podstaw naukowych nowej technologii wytwarzania selektywnych membran na bazie lipidów. Ze strony polskiej w projekcie uczestniczą: Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego (koordynator), Instytut Chemii Fizycznej PAN, Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego oraz Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN. Zadania badawcze przeznaczone do wykonania przez IKiFP (realizacja projektu rozpoczęła się w listopadzie 2007) obejmują:

1. Analizę struktury, grubości i jednorodności filmów lipidowych na powierzchniach stałych metodami elipsometrii i mikroskopii fluorescencyjnej TIRF;
2. Elektrokinetyczne pomiary potencjału powierzchniowego warstw lipidowych i określenie jego wpływu na kinetykę powstawania kontaktu trójfazowego oraz wielkości dynamicznego kąta zwilżania;
3. Pomiary stopnia i kinetyki wiązania enzymów do warstw lipidowych metodą SPR i TIRF
4. Analizę wpływu enzymów na strukturę, grubość, jednorodność, potencjał powierzchniowy filmów lipidowych oraz powstawanie i strukturę kontaktu trójfazowego

Na obecnym etapie dokonano wstępnej selekcji lipidów, które będą наносzone na podłoża stałe (mika, krzem) metodą Langmuira-Blodgett. Zastosowanie obrazującej elipsometrii oraz mikroskopii fluorescencyjnej pozwoli na pomiar nie tylko grubości (z dokładnością rzędu ułamka nanometra), ale i parametrów optycznych i struktury warstw lipidowych oraz zmian spowodowanych działaniem enzymów. Wielkość potencjału powierzchniowego dla makroskopowych powierzchni modyfikowanych filmem lipidowym będzie określona metodą pomiaru potencjału przepływu. Dodatkowo potencjał powierzchniowy zostanie skorelowany ze zwilżalnością powierzchni filmów metodą „captive bubble” umożliwiającą pomiar kąta zwilżania warstw lipidowych w środowisku wodnym. Przeprowadzone zostaną również pomiary kinetyki tworzenia kontaktu trójfazowego (TPC) na powierzchniach pokrytych filmami lipidowymi.

## 2. Casein Polyelectrolyte Multilayer Films

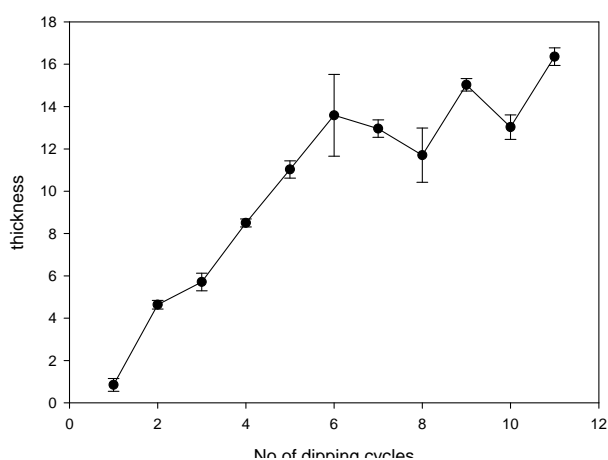
Projekt badawczy ECO-NET Francja 81/N-ECO-NET/2007/0 IUP [2007-2008]

(kierownik projektu: doc. Piotr Warszyński)

Celem projektu jest opracowanie podstaw naukowych metodologii tworzenia wielowarstwowych filmów polielektrolitowych z wbudowaną kazeiną, nadających się do późniejszego zastosowania w przemyśle mleczarskim lub w biomedycynie. Kazeina należy do grupy białek, które stosunkowo niedawno zostały wyodrębnione, jako tzw. białka naturalnie nieustrukturyzowane (ang. intrinsically unstructured protein IUP). Cechą charakterystyczną IUP jest ich „otwarta” struktura, która w dużej części zachowana jest nawet po związaniu ligandów. Struktura taka zapewnia odpowiednio dużą powierzchnię wiązania pomiędzy białkiem a ligandami i jest szczególnie interesująca ze względu na zastosowania praktyczne (duża powierzchnia oddziaływania z podłożem pokrytym filmem polielektrolitowym). Wielowarstwowe filmy polielektrolitowe mają stanowić rusztowanie i macierz dla białka, a ich właściwości i wewnętrzna struktura powinny zapewniać prawidłowe funkcjonowanie białka oraz chronić go przed utratą aktywności biologicznej. Ze względu na bardzo ważne funkcje, jakie białka IUP pełnią w organizmach żywych, prowadzi się wiele badań związanych z ich aktywnością biologiczną, a mimo to nadal stosunkowo niewiele wiadomo na temat adsorpcji i samoorganizacji tych białek. Poznanie i zrozumienie powyższych procesów jest konieczne, szczególnie ze względu na potencjalne możliwości ich praktycznego wykorzystania w biotechnologii. Zaletą kazeiny jest jej zdolność do wiązania wapnia, która to cecha daje nadzieję na potencjalne zastosowanie tego białka w biotechnologii.

Wytworzone multiwarstwowe filmy polielektrolitowe z wbudowaną kazeiną mogą być wykorzystane jako materiały do pokrywania szkliwa nazębnego, zabezpieczającego zęby przed próchnicą. Filmy kazeinowe odgrywają również istotną rolę w przemyśle mleczarskim, zapobiegając wydzielaniu się fosforanu wapnia (złogów) na ściankach przewodów i kadzi mleczarskich. Projekt jest wykonywany przez międzynarodowy zespół naukowców, w którego skład wchodzi grupa badawcza z Francji (Uniwersytet Montpellier), Polski (Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni Polskiej Akademii Nauk) i Węgier

(Instytut Biofizyki, Centrum Badań Biologicznych Węgierskiej Akademii Nauk). W ramach realizacji projektu przez IKiFP wykonano charakteryzację  $\beta$ -kazeiny, która została użyta do konstrukcji filmów wielowarstwowych. Określono aktywność powierzchniową, rozmiar i zeta potencjał kazeiny w zależności od pH. Następnie określono elipsometrycznie grubość filmów wielowarstwowych zawierających kazeinę utworzonych na powierzchni płytek krzemowych. Ponieważ kazeina w warunkach neutralnych i alkalicznych jest naładowana ujemnie do tworzenia filmów wielowarstwowych użyto polikationów: PAH, PDADMAC i MADQUAD. Stwierdzono, że dla pary MADQUAD/kazeina uzyskano filmy o największej grubości (16 nm dla 10 warstwowego filmu). Natomiast w przypadku pary PAH/kazeina filmy wielowarstwowe nie tworzą się.



Rys. 1. Elipsometryczna grubość filmów MADQUAD/ $\beta$ -kazeina

### **3. Catalysis for Environment: Depollutiation, Renewable Energy and Clean Fuels**

Projekt badawczy GDRI France [2007-2010]

*(kierownik projektu: prof. Jerzy Haber i dr Tadeusz Machej)*

W dzisiejszych czasach, zastosowanie katalizy do rozwiązania problemu globalnego oraz lokalnego zanieczyszczenia środowiska oraz energii odnawialnej jest przedmiotem badań które rozwijane ze względu na ochronę środowiska naturalnego.. Międzynarodowa sieć badawcza rozpoczęła pracę od 1 stycznia 2007. Programy badawcze są następujące: redukcja tlenków azotu (SKR, TWC, deN<sub>2</sub>O); uszlachetnianie oleju, izomeryzacja, czyste paliwa (reforming, uszlachetnianie biomasy), katalityczne utlenianie sadzy, katalityczne utlenianie lotnych związków organicznych i katalityczne oczyszczanie wody.

W ramach sieci prowadzone są wspólne badania pomiędzy IKiFP PAN a Laboratoire de Reactivite de Surface Universite Pierre et Marie Curie Paris VI dotyczące SKR tlenku azotu alkoholami na katalizatorach zeolitowych. Próbki katalizatorów produkowane są w UP et MC, natomiast testy katalityczne prowadzone są w JKiFP PAN.

#### **4. Nanostructural micro/mesoporous materials as new catalysts for the production of environmentally friendly diesel fuel**

Projekt badawczy Umowy Międzyrządowej Polski i Hiszpanii HISZPANIA/139/2006 [2007-2009]

(kierownik projektu: *doc. Mirosław Derewiński*)

Wytwarzanie oleju napędowego do silników Diesel'a w procesie Fischera-Tropscha (FTS) jest alternatywą dla dotychczas stosowanej produkcji tego paliwa na drodze przerobu ropy naftowej. Produkowane tą metodą paliwo jest pozbawione zanieczyszczeń związkami siarki i azotu, nie zawiera poliaromatów, a równocześnie charakteryzuje je wysoka liczba cetanowa (odzwierciedlająca zawartość alkanów). Niekorzystną cechą FTS jest tworzenie szerokiej gamy węglodorów, co obniża efektywność procesu w kierunku otrzymywania oleju napędowego. Niedogodność tą eliminuje się poprzez separacje z produktu najcięższych frakcji (wosków), a następnie ich selektywny hydrokraking w obecności katalizatorów dwufunkcyjnych (kwasowo-redoksowych). Celem projektu jest opracowanie sposobu preparatyki i synteza nowych, bardziej efektywnych nanomateriałów zawierających zarówno mikro- jak i mezopory o kontrolowanych rozmiarach, które mogłyby zostać wykorzystane jako silnie kwasowe matryce do produkcji bifunkcyjnych katalizatorów dla procesu hydrokrakingu wyższych parafin.

Nowe materiały kompozytowe zostały otrzymane w wyniku częściowej, hydrotermalnej rekrytalizacji glinokrzemianów o regularnej strukturze mezoporowatej (typu SBA-15). Warunkiem koniecznym prowadzonego procesu rekrytalizacji jest zachowanie w maksymalnym stopniu wyjściowej, otwartej struktury porowatej przy równoczesnym wygenerowaniu nanocząstek zeolitu typu MFI w ściankach mezoporów.

Przeprowadzono syntezę czystokrzemowych preparatów SBA-15, posiadających heksagonalne uporządkowanie mezoporów (o średnicy około 4.3 nm) oraz charakteryzujących się wysoką stabilnością termiczną. Preparaty po kalcynacji impregnowano związkami glinu w celu osadzenia Al na amorficznych ściankach mezoporów. Niezależnie od ilości wprowadzonego Al oraz zachowanej struktury wyjściowej, preparaty takie nie mogą być wykorzystane jako nośniki ze względu na brak silnych centrów kwasowych. Częściowa transformacja materiału amorficznych ścianek mezoporów w krystaliczne nanodomeny lub/i warstwy zeolitowe, m.in. typu MFI, jest konieczną funkcjonalizacją preparatów Al-SBA-15. W wyniku przeprowadzonych badań opracowano warunki częściowej, hydrotermalnej rekrytalizacji, w środowisku pary wodnej, preparatów wstępnie nasyconych roztworem organicznego szablonu. Wykazano, że impregnacja związkami glinu a następnie wygrzewanie preparatu nie wpływa znacząco na zmianę jego porowatości (pojemność sorpcyjna, średnica mezoporów). Analiza XRD preparatów po rekrytalizacji potwierdziła ograniczony zakres tworzenia fazy mikrokrytalicznej oraz zachowanie mezoporowatej struktury nowych materiałów. Analiza SEM wykazała brak zmian w wielkości oraz morfologii ziaren Al-SBA-15 oraz brak oddzielnych kryształów zeolitu MFI w próbkach. Badania TEM potwierdziły, że częściowa rekrytalizacja amorficznych ścianek mezoporów Al-SBA-15 w nanodomeny zeolitowe jest jedynym procesem zachodzącym w układzie. Stwierdzono (badania HRTEM), że częściowa rekrytalizacja, powodująca nieznaczne zmiany grubości ścianek mezoporów, jedynie w niewielkim stopniu zakłóca ich regularne uporządkowanie.

Otrzymane nanomateriały o multimodalnej strukturze porowatej oraz posiadające silnie kwasowe centra aktywne, obecne w nanodomach zeolitowych utworzonych w ściankach mezoporów, zostaną wykorzystane jako nośniki do osadzenia fazy metalicznej i przygotowania nowych, dwufunkcyjnych katalizatorów dla reakcji hydrokrakingu parafin.

## **5. The development of a substitute Ru catalyst based on Ni catalyst by improving resistance for carbon deposition and Ni sintering**

Projekt badawczy NANO Japonia [2007-2008]

*(kierownik projektu: prof. Ewa Broclawik)*

Katalizatory rutenowe są najlepszymi obecnie używanymi katalizatorami w procesie reformingu parowego. Jednakże ze względu na wzrastające ceny światowe rutenu jako produktu ubocznego przy pozyskiwaniu palladu i niklu, ilość pozyskiwanego rutenu jest niewielka i światowa dostępność jest ograniczona. Dlatego bardzo ważne jest zastąpienie katalizatorów rutenowych przez substytuty o porównywalnej aktywności.

Głównym celem projektu jest więc zaprojektowanie odpowiedniego katalizatora z niklem jako substytutem rutenu, gdzie zasadniczym problemem jest poprawa jego odporności na odkładanie depozytu węglowego oraz zwiększanie cząstek metalu. Ponieważ nikiel ma niższą temperaturę topnienia niż ruten, katalizatory Ni mają niewystarczającą odporność na powiększanie ziarna w temperaturze około 800°C. W tym projekcie szybkość wzrostu cząstek metalu w katalizatorze niklowym jest kontrolowana poprzez poprawę oddziaływania chemicznego pomiędzy nośnikiem a cząstkami metalu oraz/i optymalizację struktury powierzchni nośnika. Oddziaływanie pomiędzy nośnikiem a cząstkami metalu było badane teoretycznie. Wykonano modelowanie nośnika o różnych pokrojach, takich jak kulki, igły lub płaszczyzna. Wyniki symulacji komputerowych z uwzględnieniem współczynnika dyfuzji prowadzą do wniosku, że możliwe jest fenomenologiczne modelowanie właściwości katalizatora niklowego.

Dodatkowym celem projektu było wzmocnienie współpracy międzynarodowej w dziedzinie projektowania katalizatorów. W ramach projektu sfinansowany został jeden wyjazd do Chin i Japonii w celu wymiany informacji na temat najważniejszych osiągnięć w rozwoju katalizy na materiałach mezoporowatych.





## **PROJEKTY FUNDUSZY STUKTURALNYCH UE**



## **1. Wdrożenie technologii cementów romańskich do praktyki konserwatorskiej**

Projekt SPO-WKP 1.4.1. [2005-2008] TECHKON

(kierownik projektu: doc. Roman Kozłowski)

Celem projektu jest wprowadzenie do praktyki konserwatorskiej nowych materiałów zgodnych z cementami romańskimi oryginalnie stosowanymi w okresie XIX i początku XX wieku do łatwego i ekonomicznego wytwarzania sztukaterii na elewacjach budynków. Umożliwi to właściwą konserwację ogromnego zasobu zabytków architektury miejskiej z tego okresu. Technologię wytwarzania tych materiałów przywrócono w ramach projektu ROCEM finansowanego przez Komisję Europejską w 5 Programie Ramowym. Obecny projekt jest realizowany przez konsorcjum utworzone przez przedsiębiorstwo konserwatorskie AC Konserwacja Zabytków Piotrowski, Kosakowski s.j. i IKiFP PAN.

Struktura porowatości jest jedną z podstawowych własności zapraw, mającą ogromny wpływ na przepuszczalność wody i pary wodnej oraz wytrzymałość. Zgodność struktur porowatości zapraw historycznych i naprawczych jest istotnym kryterium ich kompatybilności tj. zdolności ich współdziałania bez wywoływania uszkodzeń. W ramach projektu porównano struktury porowatości zapraw historycznych pobranych z budynków w całej Europie oraz zapraw naprawczych wytworzonych z współczesnych cementów romańskich. Strukturę porowatą określono przy użyciu porozymetrii rtęciowej. W zaprawach historycznych stwierdzono współistnienie trzech rodzajów porów: wąskich pory o średnicach poniżej 0.2  $\mu\text{m}$ , charakterystycznych dla matrycy w pełni uwodnionego zaczynu cementowego, szerszych porów 'powietrznych' o średnicach pomiędzy 0.2-5  $\mu\text{m}$  powstających na skutek odparowania wody podczas procesu hydratacji, oraz porów dużych o średnicach większych niż 5  $\mu\text{m}$  będących wynikiem wtórnych procesów niszczenia. Stwierdzono, że objętość porów powietrznych zależała od zastosowanego historycznie stosunku wody do cementu (w/c) a ich powstawanie było ułatwione na powierzchni elementów sztukaterii, wystawionych na wysychanie. Aby naśladować zaprawy historyczne przygotowano zaprawy naprawcze o stosunku w/c zmieniającym się od 0.6 do 1.0. Zaprawy przechowywano w warunkach 100% wilgotności względnej, a próbki pobierano po czasie hydratacji zmieniającym się od 1 dnia do 3 miesięcy. W zaprawach naprawczych o niskim w/c stwierdzono unimodalny rozkład porów, o średnicach zmniejszających się wraz z czasem hydratacji. Ze wzrostem stosunku w/c zaobserwowano rozwój struktury o bimodalnym rozkładzie porów. Powstawanie szerokich porów jest wynikiem odparowania wody niezwiązanej w procesie hydratacji. W ten sposób, zmieniając stosunek w/c, można w łatwy sposób otrzymać zaprawy naprawcze o kontrolowanej strukturze porów.

Przeprowadzone badania wytrzymałości zapraw naprawczych na krystalizację soli oraz cykle zamarzania-rozmarzania wody wykazały, że rośnie ona z czasem hydratacji i obniżaniem stosunku w/c. Również siła adhezji pomiędzy zaprawą naprawczą i podłożem historycznym wzrasta wraz ze wzrostem czasu hydratacji. Najwyższe wartości siły adhezji otrzymano dla podłoża całkowicie mokrego przed nałożeniem zaprawy naprawczej, podczas gdy dla suchego siła adhezji była niewielka.



## 2. Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska

Projekt SPO-WKP 1.4.2. [2005-2008] CezaŚ  
(kierownik projektu: mgr Janusz Janas)

W drugim roku realizacji projektu zostały zrealizowane następujące dostawy urządzeń pomiarowo-badawczych oraz materiałów pomocniczych:

- stacjonarnego chromatografu gazowego GC/MS z termodesorberem,
- przenośnego wielokanałowego analizatora FT-IR,
- spektrometru FT-IR z przystawkami,
- spektrometru EDXRF Epsilon,
- stacjonarnego chromatografu cieczowego LC/MS.
- samochodu Fiat Doblo z zabudową części bagażowej na potrzeby mobilnego laboratorium,
- elementów wyposażenia pomieszczeń i laboratorium (meble, UPS, szkło laboratoryjne, odczynniki i standardy EPA).

Zostały również zrealizowane zadania związane z promocją projektu: strona internetowa, reklama prasowa na łamach dwutygodnika "Środowisko", ulotki reklamowe, wizytówki i długopisy opatrzone logo CezaŚ.

W omawianym okresie sprawozdawczym w laboratorium CezaŚ zrealizowano 6 zleceń zewnętrznych i 7 zleceń wewnętrznych obejmujących pomiary i/lub badania:

a) zlecenia zewnętrzne:

- emisji gazowych zanieczyszczeń organicznych oraz sprawności rewersyjnego reaktora katalitycznego Enviocat,
- emisji chlorowcopochodnych oraz sprawności reaktora katalitycznego "Swingtherm"
- emisji zanieczyszczeń - pomiary stężenia oraz emisji oparów zanieczyszczeń organicznych, stężenia NO<sub>x</sub> oraz fluoru, zapylenia całkowitego oraz procentu żelaza w pyłe, oznaczenia składników spalania LPG,
- emisji zanieczyszczeń - pomiary parametrów pracy emiterów oraz wielkość emisji LZO,
- konwersji LZO - pomiary sprawności rewersyjnego reaktora katalitycznego Swingtherm.

b) zlecenia wewnętrzne:

- oceny selektywności katalizatorów opracowywanych w IKiFP PAN - pomiary przy użyciu stacjonarnego chromatografu GC/MS – 2 zlecenia
- badania w zakresie środkowej podczerwieni – 4 zlecenia,
- pomiary sprawności dostarczonego katalizatora monolitycznego.

Ponadto przystosowano zakupioną aparaturę do wykonywania zleceń, wykonano wstępne analizy, przygotowano specyfikacje techniczne urządzeń pomiarowych do przetargów, wykonano projekt zabudowy samochodu na potrzeby mobilnego laboratorium oraz sporządzono część dokumentacji niezbędnej do akredytacji metod badawczych, w tym:

- przygotowano Księgi przyrządów (LOG) dla poszczególnych przyrządów pomiarowych przewidzianych do zastosowania w metodach akredytowanych zawierające pełną dokumentację sprzętu,
- napisano instrukcje działania przyrządów pomiarowych z uwzględnieniem procedur kalibracyjnych,
- przygotowano i napisano procedury ogólne systemu zarządzania jakością w laboratorium.

Laboratorium CezaŚ w kwietniu 2007 zostało członkiem rzeczywistym (nr 749) Klubu Polskich Laboratoriów Badawczych POLLAB.

### 3. Konserwatorskie systemy grzewcze dla zabytkowych kościołów

Projekt SPO-WKP 1.4.1. [2005-2008] IGNIS

(kierownik projektu: dr Łukasz Bratasz)

Podstawowym celem projektu jest wdrożenie do praktyki konserwatorskiej systemu ogrzewania zabytkowych kościołów, który z jednej strony będzie ogrzewał przebywających w nich ludzi, a z drugiej służył ochronie obiektów i ich wyposażenia. System taki powinien dostarczać ciepło:

- lokalnie do stref, gdzie przebywają ludzie, i jak najmniej zaburzać mikroklimat w pozostałej części wnętrza,
- selektywnie, za pomocą promieniowania podczerwonego, do powierzchni architektonicznych zagrożonego kondensacją wilgoci.

Projekt jest realizowany przez konsorcjum utworzone przez przedsiębiorstwo konserwatorskie Monument Service – Marcin Kozarzewski i IKiFP PAN.

Praca zespołu badawczego, w ramach pierwszej części projektu, koncentrowała się na opracowaniu zasady działania nowego systemu i badaniach określających parametry jego pracy, które wyeliminowałyby ewentualne niekorzystne oddziaływania opracowywanego systemu na znajdujące się w zabytkowych wnętrzach obiekty. W tym celu określono charakterystyki różnych elementów grzejnych pod kątem ich oddziaływania z materiałami historycznymi, określono wpływ emitowanego promieniowania na obiekty zabytkowe, doświadczalnie i numerycznie wyznaczono dopuszczalne przedziały fluktuacji parametrów mikroklimatycznych oraz wyznaczono naturalny klimat i istniejące zagrożenia wewnątrz obiektu referencyjnego – kościoła p.w. Wniebowzięcia NMP w Skępem. Ściany i sklepienie kościoła są pokryte cennymi malowidłami ściennymi pochodzącymi z lat 1750-1753. Przeprowadzone badania potwierdziły, iż najistotniejszym warunkiem właściwej ochrony obiektów zabytkowych jest ograniczenie fluktuacji wilgotności względnej spowodowanych ogrzewaniem tak, aby nie przekraczały fluktuacji naturalnych. Przyjęcie tego kryterium pozwoliło na stworzenie właściwego systemu grzewczego wraz z układami sterującymi i pomiarowymi.

Wybrano zlokalizowane ogrzewanie ławkowe zapewniające zadawalający komfort przebywającym w kościele. Opracowano dodatkowy moduł grzewczy składający się elektrycznych grzejników promiennikowych, które zapewniają krótkotrwałe ogrzanie polichromowanego sklepienia wyziębionego w zimie, w momentach zagrożeń kondensacją, kiedy w kościele przebywa na nabożeństwach duża ilość ludzi. Obydwa systemy grzewcze są włączane i wyłączane przez zaprogramowany regulator, który odbiera, przechowuje i przetwarza sygnały z czujników mierzących temperatury powietrza i powierzchni sklepienia, oraz wilgotność względną w kościele. Sterowanie jest oparte na ograniczaniu zaburzeń wilgotności względnej wywoływanych ogrzewaniem w bezpiecznym zakresie określonym przez 84 percentyl fluktuacji naturalnych wyznaczonych w trakcie długookresowego monitorowania warunków w kościele. Dodatkowo ten sam układ sterowania kontroluje pracę grzejników promiennikowych zapobiegających kondensacji, gdy tylko różnica temperatury sklepienia i temperatury punktu rosy zmniejsza się do wartości 0,5°C. Dostarczone ciepło powoduje niewielkie ogrzanie sklepienia, co zabezpiecza malowidła przed epizodami kondensacji.



## **WSPÓŁPRACA Z INNYMI INSTYTUCJAMI I PRZEMYSŁEM W ROKU 2007**

Prace o charakterze aplikacyjnym stanowią bardzo ważny aspekt działalności Instytutu. Grupy badawcze Instytutu wykonują szereg ekspertyz naukowych, nadzorują zastosowanie wyników swoich prac badawczych w praktyce, proponują nowe rozwiązania technologiczne.

W szczególności wyróżnić należy dwa kierunki prac aplikacyjnych Instytutu:

- zastosowania metody katalitycznego oczyszczania przemysłowych gazów odlotowych
- zapobieganie niszczącemu działaniu zanieczyszczeń środowiska na obiekty zabytkowe

### **1. Katalityczne oczyszczanie przemysłowych gazów odlotowych**

Opracowana w Instytucie unikatowa metoda "Swingtherm" wykorzystująca rewersyjne reaktory katalityczne do oczyszczania przemysłowych gazów odlotowych wymaga stałych prac nad rozwojem poziomu technicznego oraz rozszerzeniem gamy jego zastosowań.

Prace te ukierunkowane są na:

- rozwój zastosowań, dobór katalizatorów i warunków reakcji dla konkretnych instalacji przemysłowych (rodzaj zanieczyszczeń, skład ilościowy, wielkość emisji), z których usuwane mają być zanieczyszczenia gazowe. Prace te wykonywane są m.in. w ramach działalności statutowej Instytutu i grantów KBN.
- projektowanie i rozwój instalacji rewersyjnych reaktorów katalitycznych dla różnych wielkości instalacji przemysłowych i zastosowań.

Prowadzona jest ścisła współpraca z przedsiębiorstwami, którym udzielono licencji na produkcję i stosowanie instalacji opartych o metodę "Swingtherm". Współpraca ukierunkowana jest na prace rozwojowe nad wdrożeniami nowych instalacji i nadzór autorski nad eksploatowanymi urządzeniami (badania sprawności reaktorów rewersyjnych i aktywności katalizatorów stosowanych w pracujących instalacjach katalitycznych).

W roku 2007 przeprowadzono szereg badań i ekspertyz dla różnych podmiotów gospodarczych, w których Instytut rozwiązuje problemy związane z oczyszczaniem gazów produkcyjnych emitowanych do atmosfery, m.in.:

- dla Eko-Dom Sp. z o.o. w Łomży
- dla Enviro Polska Ltd. w Krakowie
- dla ICN Polfa SA w Rzeszowie
- dla Sumech w Krakowie
- dla Veolia Polska w Krakowie

Prace te prowadzone są w ścisłej współpracy ze Spółką z o.o. "Katalizator" w Krakowie, która jest m.in. producentem opracowywanych przez Instytut katalizatorów (w skali przemysłowej) dla potrzeb produkowanych i eksploatowanych instalacji oczyszczających.

W 2006 roku zostało utworzone, dzięki finansowaniu z funduszy Sektorowych Programów Operacyjnych, nowe laboratorium "Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska CezaŚ", którego zadaniem jest prowadzenie pomiarów i badań z zakresu ochrony środowiska na rzecz podmiotów gospodarczych i instytucji.



## **2. Zapobieganie niszczącemu działaniu zanieczyszczeń środowiska na obiekty zabytkowe**

Instytut zyskał wysoką renomę w środowiskach konserwatorskich w związku z pracami grupy doc. R. Kozłowskiego nad wyjaśnieniem fizykochemii mechanizmów zjawisk powodujących zniszczenia obiektów zabytkowych przez zanieczyszczenia środowiska naturalnego. Badania te prowadzone są w ramach prac statutowych Instytutu, kilku projektów Unii Europejskiej oraz na zlecenia instytucji ochrony zabytków.

W 2007 roku kontynuowano prace m.in. nad następującymi ekspertyzami:

- analiza mikroklimatu grotu Św. Pawła w Efezie i opracowanie koncepcji ograniczenia kondensacji wody na znajdujących się w jej wnętrzach wczesnochrześcijańskich freskach (ekspertyza na rzecz Austriackiej Misji Archeologicznej w Efezie).
- diagnoza przyczyn uszkodzeń mechanicznych zabytkowej skrzyni z laki japońskiej, tzw. 'Mazarin chest' ze zbiorów Muzeum Wiktorii i Alberta w Londynie (ekspertyza na rzecz Muzeum w ramach wieloletniego programu badań i konserwacji skrzyni).

Badania i prace wdrożeniowe nad zastosowaniem analizy EA do monitorowania uszkodzeń obiektów zabytkowych pod wpływem fluktuacji parametrów mikroklimatycznych zaowocowały zbudowaniem prototypu czujnika EA, przetestowanego również w rzeczywistych warunkach obiektów zabytkowych, takich jak kościoły i muzea. W 2007 roku Instytut podpisał umowę licencyjną z firmą Hanwell Instruments Ltd z Wielkiej Brytanii będącą światowym liderem produkującym sprzęt do monitorowania warunków przechowywania obiektów zabytkowych, o produkcji i międzynarodowym marketingu tego czujnika.

## **3. Inne opracowania i badania**

- badania właściwości fizykochemicznych próbek przemysłowych tlenków molibdenu dla ChemieMetall GmbH w Bitterfeld
- badania rozkładu metanolu ta taśmach glinowo-cyrkonowych dla Wojskowej Akademii Technicznej w Warszawie
- badania katalitycznej syntezy metanolu z CO<sub>2</sub> i H<sub>2</sub> dla Instytut Inżynierii Chemicznej PAN w Gliwicach
- badania właściwości powierzchniowych nowoczesnych materiałów do produkcji form odlewniczych dla Instytutu Odlewnictwa w Krakowie
- synteza próbek lateksów polistyrenowych o ściśle zdefiniowanych właściwościach powierzchniowych dla Instytutu Biotechnologii Surowic i Szczepionek S.A. w Krakowie

## **DOROBEK NAUKOWY INSTYTUTU W ROKU 2007**

### **PRACE OGŁOSZONE DRUKIEM**

#### **KSIĄŻKI I PODRĘCZNIKI**

1. A. Bielański "Podstawy Chemii Nieorganicznej", (ed. M. Galus), Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2002 (wydanie piąte, dodruk czwarty, 2007), pp.1016 [ISBN 83-01-13817-3]
2. A. Pomianowski "Obszary Międzyfazowe. Wybrane Zagadnienia", Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 2007, pp161 [ISBN 978-83-7493-337-7]

#### **PRACE PRZEGLĄDOWE I ROZDZIAŁY W MONOGRAFIACH**

1. Z. Adamczyk, M. Zembala, K. Jaszczółt, A. Michna, J. Barbasz "Particle Deposition as a Tool for Studying Hetero-interactions", in: "Colloid Stability. Vol.2. The Role of Surface Forces" (ed. T. Tadros), Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim 2007, pp 247-311 [ISBN 3-527-31503-9]
2. J. Haber "Electronic Factors in Hydrocarbons Oxidation Catalysis" in: "Turning Points in Solid-State Materials and Surface Science" (eds. K. D. M. Harris, P. P. Edwards), Royal Society of Chemistry Publishing, Cambridge 2007, p.568-576 [ISBN 978-0-85404-114-5]

#### **ARTYKUŁY W CZASOPISMACH O CYRKULACJI MIĘDZYNARODOWEJ**

1. Z. Adamczyk, J. Barbasz, M. Zembala "Particle Assembly on Surface Features (Patterned Surfaces)", Langmuir, 23 (2007) 5557-5562
2. Z. Adamczyk, A. Michna, M. Szaraniec, A. Bratek, J. Barbasz "Characterization of Poly(ethylene imine) Layers on Mica by the Streaming Potential and particle Deposition Methods", J. Colloid Interface Sci., 313 (2007) 86-96
3. Z. Adamczyk, P. Weroński, J. Barbasz, M. Kolasińska "Modeling Self-assembling of Colloid Particles in Multilayered Structures", Appl. Surf. Sci., 253 (2007) 5776-5780
4. Z. Adamczyk, M. Zembala, M. Kolasińska, P. Warszyński "Characterization of Polyelectrolyte Multilayers on Mica and Oxidized Titanium by Streaming Potential and Wetting Angle Measurements", Colloids Surf. A, 302 (2007) 455-460
5. A. Adamski, E. Tabor, B. Gil, Z. Sojka "Interaction of NO and NO<sub>2</sub> with the Surface of Ce<sub>x</sub>Zr<sub>1-x</sub>O<sub>2</sub> Solid Solutions – Influence of the Phase Composition", Catal. Today, 119 (2007) 114-119
6. T. Biswick, W. Jones, A. Pacuła, E. Serwicka, J. Podobiński "The Role of Anhydrous Zinc Nitrate in the Thermal Decomposition of the Zinc Hydroxy Nitrates Zn<sub>5</sub>(OH)<sub>8</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O and ZnOHNO<sub>3</sub>·H<sub>2</sub>O", J. Solid State Chem., 180 (2007) 1171-1179

7. T. Borowski, S. de Marothy, E. Brocławik, C. J. Schofield, P. E. M. Siegbahn "Mechanism for Cyclization Reaction by Clavaminc Acid Synthase. Insights from Modeling Studies", *Biochem.*, 46 (2007) 3682-3691
8. Ł. Bratasz, R. Kozłowski, D. Camuffo, E. Pagan "Impact of Indoor Heating on Painted Wood: Monitoring the Altarpiece in the Church of Santa Maria Maddalena in Rocca Pietore, Italy", *Studies in Conservation*, 52 (2007) 199-210
9. D. V. Brazhnyk, Yu. P. Zaitsev, I. V. Bacherikova, V. A. Zazhigalov, J. Stoch, A. Kowal "Oxidation of H<sub>2</sub>S on Activated Carbon KAU and Influence of the Surface State", *Appl. Catal. B*, 70 (2007) 557-566
10. E. Brocławik, M. Radoń "Peculiarities of the Electronic Structure of Cytochrome P450 Compound I: CASPT2 and DFT Modeling", *J. Chem. Theory Comput.*, 3 (2007) 728-734
11. S. Cohen-Addad, M. Krzan, R. Höhler, B. Herzhaft "Rheology of Particle Laden Foams", *Phys. Rev. Lett.*, 99 (2007) 168001–168004
12. K. Dąbrowska, M. Zembala, J. Boratyński, K. Świata-Jeleń, J. Wietrzyk, A. Opolski, K. Szczauńska, M. Kujawa, J. Godlewska, A. Górski "Hoc Protein Regulates the Biological effects of T4 Phage in Mammals", *Archiv. Microbiol.*, 187 (2007) 489-498
13. A. Drelinkiewicz, A. Waksmundzka-Góra, J.W. Sobczak, J. Stejskal "Hydrogenation of 2-Ethyl-9,10-anthraquinone on Pd-Polyaniline (SiO<sub>2</sub>) Composite Catalyst. The Effect of Humidity", *Appl. Catal. A*, 333 (2007) 219-228
14. R. Dula, R. Janik, T. Machej, J. Stoch, R. Grabowski, E. M. Serwicka "Mn-Containing Catalytic Materials for the Total Combustion of Toluene: the Role of Mn Localization in the Structure of LDH Precursor", *Catal. Today*, 119 (2007) 327-331
15. R. Dula, A. Mrzygłód, E. M. Serwicka, R. Janik, T. Machej "Manganese Oxides Deposited on Mg-Al Hydrotalcite-derived Supports for the Total Combustion of Toluene", *Polish J. Environmental Stud.*, 15, 6A (2006) 37-40 (wydano w 2007).
16. S. Dźwigaj, J. Janas, T. Machej, M. Che "Selective Catalytic Reduction of NO by Alcohols on Co- and Fe-Si Beta Catalysts", *Catal. Today*, 119 (2007) 133-136
17. S. Dźwigaj, M. Che, B. Grzybowska, I. Gressel, K. Samson "Modulation of Catalytic Properties of VSiβ Zeolite by Controlled Incorporation of V Ions", *Stud. Surf. Sci. Catal.*, 172 (2007) 385-388
18. M. Filek, M. Zembala, A. Dudek, P. Laggner, M. Kriechbaum "Electric and Structural Studies of Hormone Interaction with Chloroplast Envelope Membranes Isolated from Vegetative and Generative Rape", *J. Plant Physiol.*, 164 (2007) 861-867
19. A. Galińska-Rakoczy, B. Jachimaska, H. Strzelecka-Gołaszewska "Mechanism of Actin Polymerisation by Myosin Subfragment-1 Probed by Dynamic Light Scattering" *Bioelectrochem.*, 70 (2007) 53-57

20. B. Gawel, W. Łasocha. "Powder Diffraction Studies of Organoammonium Polymolybdates", *Z. Kristallogr. Suppl.*, 26 (2007) 611-616
21. B. Gawel, W. Łasocha, M. Zięba "New Inorganic-organic Composite ZnSe(MXDA)(1/2)", *J. Alloy Compd.*, 442 (2007) 77-79
22. L. Góra, B. Sulikowski, E. M. Serwicka "Formation of Structured Silicalite-I/ZSM-5 Composites by a Self-assembly Process", *Appl. Catal. A*, 325 (2007) 316-321
23. R. Gryboś, M. Witko "Influence of Anatase Support on Catalytic Properties of Vanadium Pentoxide", *J. Phys. Chem. C*, 111 (2007) 4216-4225
24. M. Grzywa, W. Łasocha "Structure Solution from Powder Diffraction Data – Fast and Fully ‘ab initio’ Study. Crystal Structure of Potassium and Ammonium Tetraperoxovanadates(V)", *Z. Kristallog.*, 222 (2007) 95-98
25. M. Grzywa, W. Łasocha, W. Surga "Synthesis, Characterization and Crystal Structure of Zinc Dimolybdate Pentahydrate  $ZnMo_2O_7 \cdot 5H_2O$ ", *J. Solid State Chem.*, 180 (2007) 1590-1594
26. M. Grzywa, W. Nitek, W. Łasocha "The Crystal Structures of Lithium Tetraperoxomolybdate(VI) Tetrahydrate  $Li_2[Mo(O_2)_4] \cdot 4H_2O$  and Lithium Tetraperoxotungstate(VI) Tetrahydrate  $Li_2[W(O_2)_4] \cdot 4H_2O$ ", *J. Mol. Struct.*, 828 (2007) 111-115
27. M. O. Guerrero-Pérez, J. Janas, T. Machej, J. Haber, A. E. Lewandowska, J. L. G. Fierro, M. A. Banares "Selective Destruction of Nitrogen-containing Organic Volatile Compounds over Sb-V-O Catalysts", *Appl. Catal. B*, 71 (2007) 85-93
28. J. Gurgul, M. Rams, Ż. Świątkowska, R. Kmieć, K. Tomala "Bulk Magnetic Measurements and  $^{99}Ru$  and  $^{155}Gd$  Mössbauer Spectroscopies of  $Gd_2Ru_2O_7$ ", *Phys. Rev. B*, 75 (2007) 064426
29. J. Haber, M. Nattich, T. Machej "Alkali-metal Promoted Rhodium-on-alumina Catalysts for Nitrous Oxide Decomposition", *Appl. Catal. B*, 77 (2008) 278-283
30. J. Haber, M. Wojciechowska, M. Zieliński, W. Przystajko "Effect of  $MgF_2$  and  $Al_2O_3$  Supports on the Structure and Catalytic Activity of Copper-manganese Oxide Catalysts", *Catal. Lett.*, 113 (2007) 46-53
31. J. Huang, Y. Jiang, V R. Reddy Marthala, W. Wang, B. Sulikowski, M. Hunger "In situ  $^1H$  MAS NMR Investigations of the H/D Exchange of Alkylaromatic Hydrocarbons on Zeolites H-Y, La,Na-Y, and H-ZSM-5", *Micropor. Mesopor. Mater.*, 99 (2007) 86-90
32. D. C. Hughes, D. Jaglin, R. Kozłowski, N. Mayr, D. Mucha, J. Weber "Calcination of Marls to Produce Roman Cement", *J. ASTM Int.*, 4 (2007) JAI100661

33. M. Ismael, C. A. Del Carpio, A. R. Shaikh, H. Tsuboi, M. Koyama, N. Hatakeyama, A. Endou, H. Takaba, M. Kubo, E. Broćlawik, A. Miyamoto "A DFT Study of the Heme Role in the N-Demethylation of Theophylline Mediated by Compound I of Cytochrome P450", *Mater. Trans.*, 48 (2007) 730-734
34. B. Jachimska, Z. Adamczyk "Characterization of Rheological Properties of Colloid Zirconia", *J. European Ceramic Soc.*, 27 (2007) 2209-2215
35. S. Jakiela, Ł. Bratasz, R. Kozłowski "Acoustic Emission for Tracing the Evolution of Damage in Wooden objects", *Studies in Conservation*, 52 (2007) 101-109
36. J. Janas, T. Machej, M. Che, S. Dźwigaj "State of Cobalt in CoSiBEA Zeolite and Its Role in NO SCR with Ethanol", *Stud. Surf. Sci. Catal.*, 170 (2007) 1466
37. J. Janas, T. Machej, J. Gurgul, R. P. Socha, M. Che, S. Dźwigaj "Effect of Co Content on the Catalytic Activity of CoSiBEA Zeolite in the Selective Catalytic Reduction of NO with Ethanol: Nature of the Cobalt Species", *Appl. Catal. B*, 75 (2007) 239-248
38. J. de Kerchove, P. Weroński, M. Elimelech "Deposition of Bacteria (*Pseudomonas Aeruginosa*) on "Soft" Polyelectrolyte Layer: Measurements and Model Predictions", *Langmuir*, 23 (2007) 12301-12308
39. A. Knapik, A. Drelinkiewicz, M. Szaleniec, W. Makowski, A. Waksmundzka-Góra, A. Bukowska, W. Bukowski, J. Noworól "Hydrogenation of Unsaturated Carboxylic Acids on Functional Gel-type Resin Supported Pd Catalysts. The Effect of Reactant Structure", *J. Mol. Catal. A*, 279 (2008) 47-56
40. M. Kolasińska, R. Krastev, P. Warszyński "Characteristics of Polyelectrolyte Multilayers; Effect of PEI Anchoring Layer and Post-treatment after Deposition", *J. Colloid Interface Sci.*, 305 (2007) 46-56
41. M. Krasowska, M. Kolasińska, P. Warszyński, K. Małysa "Influence of Polyelectrolyte Layers Deposited on Mica Surface on Wetting and Bubble Attachment", *J. Phys. Chem. C*, 111 (2007) 5743-5749
42. M. Krasowska, R. Krastev, M. Rogalski, K. Małysa "Air Facilitated Three Phase Contact Formation at Hydrophobic Solid Surfaces under Dynamic Conditions", *Langmuir*, 23 (2007) 549-557
43. M. Krasowska, K. Małysa "Kinetics of Bubble Collision and Attachment to Hydrophobic Solids: I. Effect of Surface Roughness", *Int. J. Mineral Process*, 81 (2007) 205-216
44. M. Krasowska, K. Małysa, "Wetting Films in Attachment of the Colliding Bubble", *Adv. Colloid Interface Sci.*, 134-135 (2007) 138-150
45. M. Krzan, J. Zawala, K. Małysa "Development of Steady State Adsorption Distribution over Interface of the Bubble Rising in Solutions of n-Alkanols (C<sub>5</sub>, C<sub>8</sub>) and Alkyltrimethylammonium Bromides (C<sub>8</sub>, C<sub>12</sub>, C<sub>16</sub>)", *Colloids Surf. A*, 298 (2007) 42-51

46. A. Kubacka, Z. Wang, B. Sulikowski, V. Cortés Corberán "Hydroxylation/oxidation of Benzene over Cu-ZSM-5 Systems: Optimization of the One-step Route to Phenol", *J. Catal.*, 250 (2007) 184-189
47. J. Łażewski, J. Korecki, K. Parliński "Phonons of (100) and (110) Iron Surfaces from First-Principles Calculations", *Phys. Rev. B*, 75 (2007) 054303
48. J. Łażewski, P. Piekarczyk, A. M. Oleś, J. Korecki, K. Parliński "Magnetically Induced Dynamical Stability of a Fe Monolayer on W(110)", *Phys. Rev. B*, 76 (2007) 205427
49. K. Łątka, J. Gurgul "<sup>119</sup>Sn Hyperfine Interactions in REAuSn (RE = Rare Earth)", *Nukleonika*, 52 (2007) S59-S62
50. J. Łojewska, M. Missori, A. Lubańska, P. Grimaldi, K. Zięba, L. M. Proniewicz, A. Ccongiu Castellano "Carbonyl Groups Development on Degraded Cellulose. Correlation between Spectroscopic and Chemical Results", *Appl. Phys. A*, (2007) 883–887
51. M. Mac, T. Uchacz, M. Andrzejak, A. Danel, P. Szlachcic, P. Nowak "Photophysical Properties of Derivatives of 1H-Pyrazolo[3,4-b]quinoline and 1H-Pyrazolo[3,4-b]quinoxaline", *Polish J. Chem.*, 81 (2007) 557-572
52. A. Micek-Ilnicka "The Effect of Water Vapour on Kinetics of Ethyl-tert-butyl ether (ETBE) and tert-Butyl alcohol (TBA) Synthesis in the gGas Phase on Wells-Dawson Catalyst", *J. Mol. Catal. A*, 277 (2007) 252-261
53. A. Micek-Ilnicka, B. Gil "FTIR and Microbalance Studies of Diammonium Ions Formation in Heteropolyacids", *Vibrational Spectr.*, 43 (2007) 435-439
54. A. Michna, Z. Adamczyk, M. Zembala "Deposition of Colloid Particles on Polyelectrolyte Multilayers", *Colloids Surf. A*, 302 (2007) 467-472
55. S. S. Ng, K. L. Kavanagh, M. A. McDonough, D. Butler, E. S. Pilka, B. M. Lienard, J. E. Bray, P. Savitsky, O. Gileadi, F. von Delft, N. R. Rose, J. Offer, J. C. Scheinost, T. Borowski, M. Sundstrom, C. J. Schofield, U. Oppermann "Crystal Structures of Histone Demethylase JMJD2A Reveal Basis for Substrate Specificity", *Nature*, 448 (2007) 87-91
56. I. Nowak, M. Misiewicz, M. Ziółek, A. Kubacka, V. Cortés Corberán, B. Sulikowski "Catalytic Properties of Niobium and Gallium Oxide Systems Supported on MCM-41 Type Materials", *Appl. Catal. A*, 325 (2007) 328–335
57. A. Pacuła, R. Mokaya "Layered Double Hydroxides as Templates for Nanocasting Porous N-Doped Graphitic Carbons via Chemical Vapour Deposition", *Micropor. Mesopor. Mater.*, 106 (2007) 147-154
58. T. Pańczyk "Collisions of Ideal Gas Molecules with a Rough/fractal Surface. A Computational Study", *J. Comput. Chem.*, 28 (2007) 681-688

59. T. Pańczyk "Comparative Analysis of Nitrogen Adsorption Kinetics on Fe(100) And Fe(111) Based on Applying the Statistical Rate Theory", *J. Phys. Chem. C*, 111 (2007) 3175-3184
60. T. Pańczyk, T. Warzocha, W. Rudziński "Molecular Dynamics Study of the Equilibrium Flux of Gas Molecules to a Fractal/rough Surface. Effects of Gas Atom Diameter", *Appl. Surf. Sci.*, 253 (2007) 5846-5850
61. G. Para, P. Warszyński "Cationic Surfactant Adsorption in the Presence of Divalent Ions", *Colloids Surf. A*, 300 (2007) 346-352
62. V. Pashkova, P. Sarv, M. Derewiński "Composite Porous Materials Containing Zeolitic Domains Prepared by Controlled Partial Recrystallization of Amorphous Aluminosilicates", *Stud. Surf. Sci. Catal.*, 170A (2007) 289-296
63. Q. Pei, C. A. Del Carpio, H. Tsuboi, M. Koyama, A. Endou, M. Kubo, E. Broclawik, K. Nishijima, T. Terasaki, A. Miyamoto "Theoretical Study on the ATP Hydrolysis Mechanism of HisP Protein, the ATP-Binding Subunit of ABC Transporter", *Mater. Trans.*, 48 (2007) 735-739
64. W. Piasecki, W. Rudziński "Application of the Statistical Rate Theory of Interfacial Transport to Investigate the Kinetics of Divalent Metal Ion Adsorption onto the Energetically Heterogeneous Surfaces of Oxides and Activated Carbons", *Appl. Surf. Sci.*, 253 (2007) 5814-5817
65. W. Piasecki, P. Zarzycki, W. Rudziński "Relaxation Time of Proton Adsorption from Solution onto Magnetite and Anatase: Classical and New Theoretical Approach", *Croatia Chimica Acta*, 80 (2007) 345-349
66. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, J. Jiao, J. Huang, M. Hunger, B. Sulikowski "Isomerization of  $\alpha$ -Pinene over Dealuminated Ferrierite-type Zeolites", *J. Catal.*, 252 (2007) 161-170
67. R. Reitinger, B. Pfau, L.-M. Stadler, B. Sepioł, G. Vogl, S. Stankov, F. Zontone, N. Spiridis, J. Korecki "Morphology of Fe/MgO(001) Ultrathin Films", *J. Appl. Phys.*, 102 (2007) 034310
68. W. Rudziński, W. Płaziński "Theoretical Description of the Kinetics of Solute Adsorption at Heterogeneous Solid/solution Interfaces. On the Possibility of Distinguishing between the Diffusional and the Surface Reaction Kinetics Models", *Appl. Surf. Sci.*, 253 (2007) 5827-5840
69. W. Rudziński, W. Płaziński "Reply to Comment on 'Kinetics of Solute Adsorption at Solid/Solution Interfaces: a Theoretical Development of the Empirical Pseudo-First and Pseudo-Second Order Kinetic Rate Equations, Based on Applying the Statistical Rate Theory of Interfacial Transport'", *J. Phys. Chem. C*, 111 (2007) 319-319

70. W. Rudziński, W. Płaziński "Studies of the Kinetics of Solute Adsorption at Solid/solution Interfaces: on the Possibility of Distinguishing between the Diffusional and the Surface Reaction Kinetic Models by Studying the Pseudo-First Order Kinetics", *J. Phys. Chem. C*, 111 (2007) 15100-15110
71. M. Ruszel, B. Grzybowska, M. Łaniecki, M. Wójtowski "Au/Ti-SBA-15 Catalysts in CO and Preferential (PROX) CO Oxidation", *Catal. Comm.*, 8 (2007) 1284-1286
72. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Quantum Chemical Description of Oxygen Activation Process on Co, Mn, and Mo Metalloporphyrins", *J. Chem. Theory Comp.*, 3 (2007) 914-920
73. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, G. Stochel "Theoretical DFT Studies on Interactions of Small Biologically Active Molecules with Isolated Heme Group", *J. Comput. Chem.*, 28 (2007) 825-831
74. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko "From Activation of Dioxygen to formation of High-Valent Oxo Species. Ab-initio DFT Studies", *J. Mol. Catal. A*, 275 (2007) 113-120
75. L. Samek, A. De Maeyer-Worobiec, Z. Spólnik, L. Bencs, V. Kontozova, Ł. Bratasz, R. Kozłowski, R. Van Grieken "The Impact of Electric Overhead Radiant Heating on the Indoor Environment of Historic Churches", *J. Cultural Heritage*, 8 (2007) 361-369
76. K. Samson, B. Grzybowska "Oxidative Dehydrogenation of Isobutane on VO<sub>x</sub>/oxide Support Catalysts: Effect of the Potassium Additive", *Polish J. Chem.*, 81 (2007) 1345-1354
77. A. R. Shaikh, E. Brocławik, H. Tsuboi, M. Koyama, A. Endou, H. Takaba, M. Kubo, C A. Del Carprio, A. Miyamoto "Oxidation Mechanism for the Metabolism of (S)-N-[1-(3-Morpholin-4-ylphenyl)ethyl]-3-phenylacrylamide on Oxyferryl Active Site in CYP3A4 Enzyme: DFT Modeling", *J. Mol. Model.*, 13 (2007) 851-860
78. A. R. Shaikh, C. A. Del Carprio, H. Tsuboi, M. Koyama, N. Hatakeyama, A. Endou, H. Takaba, M. Kubo, E. Brocławik, A. Miyamoto "Does Metabolism of (S)-N-[1-(3-Morpholin-4-ylphenyl)ethyl]-3-phenylacrylamide Occur at the Morpholine Ring? Quantum Mechanical and Molecular Dynamics Studies", *Mater. Trans.*, 48 (2007) 740-74
79. J. Słoczyński, R. Grabowski, A. Kozłowska, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Interaction of Oxygen with the Surface of Vanadia Catalysts", *J. Mol. Catal. A*, 277 (2007) 27
80. R. P. Socha, N. Pommier, J. Fransaer "Effect of Deposition Conditions on the Formation of Silica-silicate Thin Films", *Surf. Coatings Technol.*, 201 (2007) 119
81. S. Stankov, R. Röhlberger, T. Ślęzak, M. Sladeczek, B. Sepioł, G. Vogl, A. I. Chumakov, R. Ruffer, N. Spiridis, J. Łazewski, K. Parliński, J. Korecki "Phonons in Iron: from the Bulk to an Epitaxial Monolayer", *Phys. Rev. Lett.*, 99 (2007) 185501
82. P. Szabelski, T. Pańczyk "Computer Modeling of Dissociative Gas Adsorption on Laser-roughened Surfaces", *Appl. Surf. Sci.*, 253 (2007) 5622-5627



83. J. Szaleniec, M. Modrzejewski, M. Szaleniec, W. Wszolek, "Application of New Acoustic Parameters in Ann-Aided Pathological Speech Diagnosis", *Archives Acoustics*, 32, (2007) 1–10
84. M. Szaleniec, C. Hagel, M. Menke, P. Nowak, M. Witko, J. Heider "Kinetics and Mechanism of Oxygen-Independent Hydrocarbon Hydroxylation by Ethylbenzene Dehydrogenase", *Biochem.*, 46 (2007) 7637-7646
85. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała "Deposition of Core Latex Particles Encapsulated in Polyelectrolyte Shells at Modified Mica Surfaces", *J. Colloid Interface Sci.*, 314 (2007) 398-404
86. T. Ślęzak, J. Łażewski, S. Stankov, K. Parliński, R. Reitinger, M. Rennhofer, R. Rüffer, B. Sepioł, M. Ślęzak, N. Spiridis, M. Zając, A. I. Chumakov, J. Korecki "Phonons at the Fe(110) Surface", *Phys. Rev. Lett.*, 99 (2007) 066103
87. T. Ślęzak, M. Ślęzak, K. Matlak, R. Rohlsberger, C. l'Abbe, R. Rüffer, N. Spiridis, M. Zając, J. Korecki "The Influence of the Interlayer Exchange Coupling on the Magnetism of an Fe(001) Monolayer", *Surf. Sci.*, 601 (2007) 4300
88. S. Terzić, V. Jovanović, D. Tripković, A. Kowal, J. Stoch "Electrochemical and Microstructural Characterisation of Platinum Supported on Glassy Carbon", *Chem. Ind.*, 61 (2007) 135-141
89. S. Terzić, D. Tripković, V. Jovanović, A. Tripković, A. Kowal "Effect of Glassy Carbon Properties on the Electrochemical Deposition of Platinum Nano-catalyst and Its Activity for Methanol Oxidation", *J. Serb. Chem. Soc.*, 72 (2007) 165-181
90. A. Tripković, S. Gojković, K. Popović, J. Lović, A. Kowal "Study of the Kinetics and the Influence of  $B_{irr}$  on Formic Acid Oxidation at  $Pt_2 Ru_3/C$ ", *Electrochimica Acta*, 53 (2007) 887-893
91. R. Vyskocilova, W. Schwarz, D. Mucha, D. Hughes, R. Kozłowski, J. Weber "Hydration Processes in Pastes of Roman and American Natural Cements", *J. ASTM Int.*, 4 (2007) JAI100669
92. J. Weber, N. Gadermayr, R. Kozłowski, D. Mucha, D. Hughes, D. Jaglin, W. Schwarz, "Microstructure and Mineral Composition of Roman Cements Produced at Defined Calcination Conditions", *Mater. Characterization*, 58 (2007) 1217–1228
93. J. Weber, N. Mayr, K. Bayer, D. C. Hughes, R. Kozłowski, M. Stillhammerova, D. Ullrich, R. Vyskocilova "Roman Cement Mortars in Europe's Architectural Heritage of the 19th Century", *J. ASTM Int.*, 4 (2007) JAI100667
94. P. Weroński "Effect of Electrostatic Interaction on Deposition of Colloid on Partially Covered Surfaces. I. Model Formulation", *Colloids Surf. A*, 294 (2007) 254-266
95. P. Weroński "Effect of Electrostatic Interaction on Deposition of Colloid on Partially Covered Surfaces. II. Results of Computer Simulations", *Colloids Surf. A*, 294 (2007) 267-279

96. P. Weroński, Z. Jiang, S. Rasmussen "Molecular Dynamics Study of Small PNA Molecules in Lipid-Water System", *Biophys. J.*, 92 (2007) 3081-3091
97. G. Wiegosiński, A. J. Grochowalski, T. Machej, T. Pająk, W. Cwiakalski "Catalytic Destruction of 1,2-Dichlorobenzene on V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-WO<sub>3</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> Catalyst", *Chemosphere*, 67 (2007) S1 50-S1 54
98. B. Włodarczyk-Gajda, A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Synthesis and Crystal-structure Determination of Fibrillar Methylammonium Trimolybdate Hydrate", *Powder Diffraction*, 22 (2007) 241-245
99. M. Zając, K. Freindl, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, N. Spiridis, J. Korecki "Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy Studies of Ultrathin Fe Films on MgO(001)", *Surf. Sci.*, 601 (2007) 4305
100. R. Zalecki, A. Kołodziejczyk, J. Korecki, N. Spiridis, M. Zając, A. Kozłowski, Z. Kąkol, D. Antolak "Photoemission Electronic States of Epitaxially Grown Magnetite Films", *J. Alloys Compd.*, 442 (2007) 299
101. P. Zarzycki "Computational Study of Proton Binding at the Rutile/Electrolyte Solution Interface", *J. Phys. Chem. C*, 111 (2007) 7692-7703
102. P. Zarzycki "Monte Carlo Modeling of Ion Adsorption at the Energetically Heterogeneous Metal Oxide/electrolyte Interface: Micro- and Macroscopic Correlations between Adsorption Energies", *J. Colloid Interface Sci.*, 306 (2007) 328-336
103. P. Zarzycki "Effective Adsorption Energy Distribution Function as a New Mean-field Characteristic of Surface Heterogeneity in Adsorption Systems with Lateral Interactions", *J. Colloid Interface Sci.*, 311 (2007) 622-627
104. P. Zarzycki "Kinetic Monte Carlo Study of Proton Binding at the Metal Oxide/electrolyte Interface", *J. Colloid Interface Sci.*, 315 (2007) 54-62
105. P. Zarzycki "Comparison of the Monte Carlo Estimation of Surface Electrostatic Potential at the Hematite (0001)/electrolyte Interface with the Experiment", *Appl. Surf. Sci.*, 253 (2007) 7604-7612
106. P. Zarzycki, P. Szabelski, W. Piasecki "Modelling of ζ-Potential of the Montmorillonite/electrolyte Solution Interface", *Appl. Surf. Sci.*, 253 (2007) 5791-5796
107. J. Zawala, M. Krasowska, T. Dąbroś, K. Małysa "Influence of the Bubble Kinetic Energy on Its Bouncing During Collisions with Various Interfaces", *Can. J. Chem. Eng.*, 85 (2007) 669-678
108. J. Zawala, K. Świąch, K. Małysa "A Simple Physicochemical Method for Detection of Organic Contaminations in Water Reservoirs", *Colloids Surf. A*, 302 (2007) 293-300
109. M. Zimowska, A. Michalik-Zym, R. Janik, T. Machej, J. Gurgul, R. Socha, J. Podobiński, E. M. Serwicka "Catalytic Combustion of Toluene over Mixed Cu-Mn Oxides", *Catal. Today*, 119 (2007) 321-326

110. M. Zimowska, A. Michalik-Zym, J. Połtowicz, M. Bazarnik, K. Bahranowski, E. M. Serwicka "Catalytic Oxidation of Cyclohexene over Metalloporphyrin Supported on Mesoporous Molecular Sieves of FSM-16 Type - Steric Effects Induced by Nanospace Constraints", *Catal. Today*, 124 (2007) 55-60

#### **ARTYKUŁY W CZASOPISMACH I KSIĄŻKACH O OGRANICZONEJ CYRKULACJI I ARTYKUŁY POPULARNO-NAUKOWE**

1. G. Adamski "Cement romański - tajemnica krakowskich kamienic", *Wszechświat*, 108 (2007) 1138
2. A. Bielański "Węgiel – pierwiastek o stu obliczach", *Wszechświat*, 108 (2007) 91-92
3. A. Bielański "Marian Mięśowicz jak go pamiętam" in: "Marian Mięśowicz życie i dzieło 1907-1992", *Polska Akademia Umiejętności*, Kraków 2007, p.181-184
4. A. Bielański, A. M. Kobos "Optymistyczny świadek wieku" in: "Po drogach uczonych", (ed. W. Lohman), *Polska Akademia Umiejętności*, Kraków 2007, p.73-87 [ISBN 978-83-601834-3-4]
5. A. Delinkiewicz "Recenzja podręcznika: M. Litwin S. Styka-Wlazło, J. Szymońska 'Chemia ogólna i nieorganiczna. Kształcenie ogólne w zakresie podstawowym. Podręcznik dla liceum ogólnokształcącego, liceum profilowanego', Wyd. Nowa Era" in: "Prace Komisji do Oceny Poręczników Szkolnych. Tom V", (eds. A. Kastory, G. Chomicki), *Polska Akademia Umiejętności*, Kraków 2007, p.317-323
6. A. Delinkiewicz "Recenzja podręcznika: 'Chemia. Podręcznik dla kształcenia podstawowego w liceach i technicach', wyd. I" in: "Prace Komisji do Oceny Poręczników Szkolnych. Tom V", (eds. A. Kastory, G. Chomicki), *Polska Akademia Umiejętności*, Kraków 2007, p.357-364
7. A. Delinkiewicz "Recenzja podręcznika: K. M. Pazdro, W. Danikiewicz 'Chemia dl licealistów. Podstawy, część II Pierwastki i związki chemiczne" in: "Prace Komisji do Oceny Poręczników Szkolnych. Tom V", (eds. A. Kastory, G. Chomicki), *Polska Akademia Umiejętności*, Kraków 2007, p.379-384
8. U. Filek "Polimery", *Wszechświat*, 108 (2007) 136-137
9. J. Haber, A. M. Kobos "Kataliza w dużym stopniu zdeterminuje przyszłość świata" in: "Po drogach uczonych", (ed. W. Lohman), *Polska Akademia Umiejętności*, Kraków 2007, p.299-318 [ISBN 978-83-601834-3-4]
10. J. Korecki "Temperatura, ciśnienie i my", *Wszechświat*, 108 (2007) 137
11. W. Kraus "Wiele hałasu o nic?", *Forum Akademickie*, (3) (2007) 26-27
12. W. Kraus, D. Kraus "Zapiski do historii ruchu ochrony przyrody na ziemiach polskich. I. Wokół pojęcia pomnik przyrody w XIX i na początku XX wieku (A)", *Rocznik Przemyski*, 43 (2007) 76-131

13. Ł. Mokrzycki "T-shirt i chromatografia", *Wszechświat*, 108 (2007) 137-138
14. . Nowak "Elektrokataliza w ogniach paliwowych", *Biul. Polskiego Stowarzyszenia Wodoru i Ogni Paliwowych*, 2 (2007) 70-79
15. P. Nowak "Półprzewodniki w ochronie środowiska", *Wszechświat*, 108 (2007) 123-125
16. P. Nowak, K. Laajalehto "On the Interpretation of the XPS Spectra of Adsorbed Layers of Flotation Collectors - Ethyl Xanthate on Metallic Lead", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 41(2007) 107-116
17. B. A. Owsiana, D. Kraus, W. Kraus, Z. Malinowska "Zespół dworsko-parkowy w Izdebkach", *Rocznik Przemyski*, 43 (2007) 47-58
18. B. Świątkowska "Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN", *Wszechświat*, 108 (2007) 143-144
19. P. Weroński, "Effect of Electrostatic Interaction on Deposition of Colloid on Partially Covered Surfaces" in: "Mathematical Modeling and Analysis - Research Highlights, Spring 2007", Los Alamos National Laboratory (2007)
20. P. Weroński, Y. Jiang, S. Rasmussen, "Calculating Energy of Hydrogen Bonds Formed Between Peptide Nucleic Acid and Lipid Bilayer" in: "Mathematical Modeling and Analysis - Research Highlights, Spring 2007", Los Alamos National Laboratory (2007)
21. P. Weroński "A Lifelike Machine", *Los Alamos Science and Technology Magazine*, (2007) 1663
22. P. Weroński, Z. Adamczyk, J. Barbasz, "Molecular Dynamics Simulations of Micellar Dynamics and Stability" in: "Mathematical Modeling and Analysis - Research Highlights, Spring 2007", Los Alamos National Laboratory (2007)
23. W. Włodarczyk, A. Węgrzynowicz "Naturalne katalizatory - enzymy", *Wszechświat*, 108 (2007) 1139
24. D. Wodka "Półprzewodniki w ochronie środowiska", *Wszechświat*, 108 (2007) 138-139
25. J. Zawała, J. Drzymała, K. Małyś "Natural Hydrophobicity and Flotation of Fluorite", *Physicochem. Problems Mineral Process.*, 41 (2007) 5-11

#### **ARYKUŁY W RECENZOWANYCH MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH**

1. Z. Adamczyk, K. Jaszczólt "Particles at interfaces. Interactions", *Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice*, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.25-32 [ISBN 83-7076-125-9]
2. Ł. Bratasz, R. Kozłowski, D. Camuffo "Target Microclimate for Preservation Derived from Past Indoor Conditions", *Contributions to the Museum Microclimates Conf.* (eds. T. Padfield, K. Borchersen), The National Museum of Denmark, Copenhagen 2007, p.129-134 [ISBN 978-87-7602-080-4]

3. A. Bratek, Z. Adamczyk, A. Michna, M. Zembala, M. Szaraniec "Characterization of Polyelectrolytes in the Bulk and at Solid/liquid Interface", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.57-60 [ISBN 83-7076-125-9]
4. A. Burkat-Dulak, V. Valtchev, M. Derewiński "Preparation of Hierarchical Micro-/macroporous Zeolite BEA Structure", Proc. of 14<sup>th</sup> Zeolite Forum, Kocierz 2007, (ed. M. Derewiński, V. Pashkova), PTZ i IKiFP PAN, Kraków 2007, p.161-166 [ISBN 978-83-60514-05-4]
5. D. Dronka-Góra, G. Para, P. Warszyński "Adsorption Surfactants and Polyelectrolytes at Interfaces", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.53-56 [ISBN 83-7076-125-9]
6. M. Elżbieciak, M. Kolasińska, P. Warszyński "Effect of Polyion Charge on Thickness and Wetting Properties of Polyelectrolyte Multilayers", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.223-226 [ISBN 83-7076-125-9]
7. U. Filek, B. Sulikowski "Oxidation of Norbornene over Heteropolyacids and Their Salts", Proc. of 14<sup>th</sup> Zeolite Forum, Kocierz 2007, (ed. M. Derewiński, V. Pashkova), PTZ i IKiFP PAN, Kraków 2007, p.327-337 [ISBN 978-83-60514-05-4]
8. B. Gil, J. Čejka, J. Datka, B. Sulikowski "Zeolites – Supramolecular Entities of Tunable Properties", Proc. 9<sup>th</sup> Polish Supramolecular Chemistry Network Conf. Nano2007 Supramolecular Chemistry and Advanced Materials, (ed. W. Macyk, K. Szaciłowski), Wydawnictwo UJ, Kraków 2007, p.100-104 [ISBN 978-83-924498-1-2]
9. B. Gil, J. Janas, A. Kubacka, E. Włoch, Z. Olejniczak, J. Datka, B. Sulikowski "In Quest of Aactive Sites for NO<sub>x</sub> Removal over Ferrierite" Recent Research Reports, 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf. (eds., Y. Liu, W. Yan), Beijing 2007, p.228-229
10. B. Jachimska, M. Wasilewska, Z. Adamczyk "Characterization of Globular Proteins: Dynamic Light Scattering, Electrophoretic Mobility and Dynamic Viscosity Measurements", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.247-251 [ISBN 83-7076-125-9]
11. T. Jasiński, F. Cuisinier, P. Warszyński "Molecular Dynamics Simulations of Polyelectrolytes: Effect of Force Field Parameters on the Conformations and Effective Charge", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.219-222 [ISBN 83-7076-125-9]
12. T. Jasiński, B. Jachimska, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Structure of Polyelectrolyte Determined from Simulations and Viscosity Measurements: Poly(allylamine hydrochloride) (PAH)", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p. 61-64 [ISBN 83-7076-125-9]

13. M. Krzan, J. Zawala, K. Malysa "Dynamic Structure of Adsorption Layer over Interface of the Bubble Rising in Protein Solutions", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.91-96 [ISBN 83-7076-125-9]
14. A. Micek-Ilnicka, B. Gil "Heteropolyacids Based Supramolecular System", Proc. 9<sup>th</sup> Polish Supramolecular Chemistry Network Conf. Nano2007 Supramolecular Chemistry and Advanced Materials, (ed. W. Macyk, K. Szaciłowski), Wydawnictwo UJ, Kraków 2007, p.92-94 [ISBN 978-83-924498-1-2]
15. Ł. Mokrzycki, B. Sulikowski "Isomerization of  $\alpha$ -Pinene on ZSM-12 Type Zeolite", Recent Research Reports, 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf. (eds., Y. Liu, W. Yan), Beijing 2007, p. 211-212
16. Ł. Mokrzycki, B. Sulikowski "Isomerization of  $\alpha$ -Pinene over Desilicated ZSM-12 Type Zeolites", oral presentation by Ł.M., Proc. of 14<sup>th</sup> Zeolite Forum, Kocierz 2007, (ed. M. Derewiński, V. Pashkova), PTZ i IkiFP PAN, Kraków 2007, p. 239-241 [ISBN 978-83-60514-05-4]
17. A. Pacuła, R. Mokaya "As-synthesized Zeolite  $\beta$  as Template for Preparation of Porous Carbon Materials via Chemical Vapour Deposition", Proc. of 14<sup>th</sup> Zeolite Forum, Kocierz 2007, (ed. M. Derewiński, V. Pashkova), PTZ i IkiFP PAN, Kraków 2007, p. 137-142 [ISBN 978-83-60514-05-4]
18. H. Pálková, M. Zimowska, Z. Olejniczak, E. M. Serwicka "Alumination of Porous Clay Heterostructures Prepared from Synthetic Trioctahedral Smectite via Templating Process", Book of Abstracts. EUROCLAY Conf., Aveiro 2007, p.101
19. G. Para, P. Warszyński "Effect of Divalent Ions on Adsorption of Cethyltrimethylammonium Salts", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.65-69 [ISBN 83-7076-125-9]
20. V. Pashkova, W. Pudło, E. Bielańska, Z. Czuła, A. Jarzębski, M. Derewinski "Composite Materials Containing Zeolitic Layers Deposited on the Silica and Silica/alumina Porous Monoliths", Proc. of 14<sup>th</sup> Zeolite Forum, Kocierz 2007, (ed. M. Derewiński, V. Pashkova), PTZ i IkiFP PAN, Kraków 2007, p.155-160 [ISBN 978-83-60514-05-4]
21. W. Płaziński, W. Rudziński "Application of the Statistical Rate Theory to Describe the Kinetics of Adsorption at Solid/solution Interfaces", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.33-35 [ISBN 83-7076-125-9]
22. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, M. Zembala, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Stability of Microcapsules with Biocompatible Polyelectrolyte Shells Chitosan/alginate", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.211-214 [ISBN 83-7076-125-9]

23. L. Szyk-Warszyńska, M. Kolasińska A. Trybała, M. Zembala, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Encapsulation by Biocompatible Polyelectrolyte Multilayers", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.343-350 [ISBN 83-7076-125-9]
24. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, P. Warszyński "Deposition of Fluorescently Labelled Model Microcapsules at Steel Surface", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.215-218 [ISBN 83-7076-125-9]
25. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Permeability of Polyelectrolyte Shells for Fluorescein Containing Microcapsules Suspended in Solution and Attached to a Surface", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.351-354 [ISBN 83-7076-125-9]
26. A. Węgrzynowicz, E. Bielańska, M. Derewiński "Właściwości strukturalne membran zeolitowych typu MFI otrzymywanych metodą in-situ oraz „wtórnego wzrostu", Proc. of 14<sup>th</sup> Zeolite Forum, Kocierz 2007, (ed. M. Derewiński, V. Pashkova), PTZ i IkiFP PAN, Kraków 2007, p.185-194 [ISBN 978-83-60514-05-4]
27. J. Węgrzyńska, G. Para, J. Chlebicki, P. Warszyński, K. A. Wilk "Adsorption Mechanism of Multiple Ammonium Salts at the air Solution Interface", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.69-72 [ISBN 83-7076-125-9]
28. J. Węgrzyńska, G. Para, J. Chlebicki, P. Warszyński, K. A. Wilk "Wetting Ability of Multiple Ammonium Salts", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.501-504 [ISBN 83-7076-125-9]
29. W. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "Theoretical Description of Electronic and Geometric Structure of Some Mesogenic Molecules", Proc. Symp. 17<sup>th</sup> Conf. on Liquid Crystals - Chemistry, Physics and Applications (ed. J. Żmija), Proceedings of SPIE, Warszawa 2007
30. J. Zawała, K. Małysa "On Mechanism of the Rising Bubble Bouncing from the Water/Gas Interface", Proc. Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007, (ed. K. A. Wilk), Palmapress, Wrocław 2007, p.97-100 [ISBN 83-7076-125-9]
31. M. Zimowska, L. Góra, J. Morgiel, E. Bielańska, D. Su, E. M. Serwicka "Simultaneous Control of Morphology and Porosity in SBA-15: Soft-hard Templating", Proc. of 14<sup>th</sup> Zeolite Forum, Kocierz 2007, (ed. M. Derewiński, V. Pashkova), PTZ i IkiFP PAN, Kraków 2007, p.179-184 [ISBN 978-83-60514-05-4]
32. M. Zimowska, Z. Olejniczak, E. M. Serwicka, M. Bazarnik, K. Bahranowski "<sup>27</sup>Al MAS NMR and <sup>29</sup>Si MAS NMR Study of Kanemite Precursor of FSM-16 Mesoporous Sieves", Book of Abstracts. EUROCLAY Conf., Aveiro 2007, p.100

## STRESZCZENIA W MATERIAŁACH KONFERENCYJNYCH

1. Z. Adamczyk "Adsorption of Colloid Particles at Heterogeneous Surfaces Bearing Sites of Various Shapes", Proc. ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007, p.72
2. Z. Adamczyk, J. Barbasz "Particle Deposition on Heterogeneous Surface (Surface Features)", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.54
3. Z. Adamczyk, P. Weroński, J. Barbasz "Layer by Layer deposition of Colloid Particles", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.53
4. E. Banach, P. Kozyra, P. Rejmak, E. Broclawik, J. Datka "Modelowanie QM/MM centrów kobaltowych w ferrierycie", Proc. of 14<sup>th</sup> Zeolite Forum, Kocierz 2007, (ed. M. Derewiński, V. Pashkova), PTZ i IkiFP PAN, Kraków 2007, [ISBN 978-83-60514-05-4]
5. E. Banach, P. Kozyra, P. Rejmak, E. Broclawik, J. Datka "Cobalt Cationic Sites in Ferrierites: QM/MM Modeling", Proc. AWWPA 2007 Symp. on Air and Water Pollution Abatement, Zakopane 2007, p.181
6. J. Barbasz, Z. Adamczyk "Particle Assembly on Surface Features of Various Shape", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.46
7. J. Barbasz, Z. Adamczyk, M. Zembala "Nowa metoda wizualizacji nanostruktur powierzchniowych o różnych kształtach za pomocą cząstek koloidalnych", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.366 [ISBN 978-83-60514-04-7]
8. M. Bazarnik, K. Bahranowski M. Zimowska, A. Gawel, E. M. Serwicka "Silica-based Mesoporous Materials Derived from Layered Silicate-kanemite", 8th Int. Conf. of PhD. Students and Young Scientists, Herl'any 2007, Mineralia Slovaka, 39, 2, (2007), p.5
9. M. Bazarnik, K. Bahranowski, M. Zimowska, E. M. Serwicka "FSM-16 - Mesoporous Materials Derived from Layerd Polysilicate", Proc. 9<sup>th</sup> EMU School, Munich 2007, p.55-56
10. A. Bielański "Kinetics and Mechanism of Gas Phase Catalytic Reactions on Solid Hetropolyacids. Case Study: Tertiary Ethers Synthesis", Proc. 8<sup>th</sup> Int. Conf. of the Romanian Catalysis Society, Bucharest 2007, p.10–11
11. A. Bratek, Z. Adamczyk, T. Jasiński, P. Warszyński "Polyelectrolyte Stuctures in Solution - Simulations and Measurements", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.57



12. A. Bratek, Z. Adamczyk, T. Jasiński, P. Warszyński "Deposition of Particles on Polyelectrolyte Covered Surfaces", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.44
13. A. Bratek, Z. Adamczyk, A. Michna, M. Zembala "Particles Deposition on Surfaces Covered by Polyelectrolytes", Proc. ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007, p.413
14. A. Bratek, Z. Adamczyk, A. Michna, M. Zembala "Particles Deposition on Surfaces of Controlled Heterogeneity", Proc. 9<sup>th</sup> Conf. on Colloid Chemistry, Siofok 2007, p.66
15. A. Bratek, Z. Adamczyk, A. Michna, M. Zembala "Characterication of Polyelectrolytes in the Bulk and at Solid/liquid Interfaces", Proc. 9<sup>th</sup> Conf. on Colloid Chemistry, Siofok 2007, p.94
16. T. Borowski "Reaction Mechanism of a Retinal-Forming Carotenoid Oxygenase – A DFT Study", Proc. Conf. Modeling Interactions in Biomolecules, Prague 2007
17. T. Borowski, S. de Marothy, E. Brocławik, C. J. Schofield, P. E. M. Siegbahn "Mechanism for Cyclization Reaction by Clavaminc Acid Synthase. Insights from Modeling Studies", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.19 [ISBN 978-83-60514-04-7]
18. E. Brocławik, T. Borowski, M. Radoń, A. R. Shaikh "Electronic and Steric Factors in Enzymatic Activity of Oxyferryl Iron Sites", Book of Abstracts. 6<sup>th</sup> Central European Symp. on Theoretical Chemistry, Litschau 2007, L5
19. E. Brocławik, T. Borowski, M. Radoń, A. R. Shaikh "Electronic and Steric Factors in Enzymatic Oxidation on Oxoferryl Iron Sites", Materials f Conference. 3<sup>rd</sup> Symposium on Theoretical Biophysics TheoBio-07, Cetraro 2007
20. E. Brocławik, P. Kozyra, J. Załucka, J. Datka "Interaction of Benzene with Cu<sup>+</sup> and Ag<sup>+</sup> Sites in ZSM-5", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007, p.1635
21. A. Bukowska, W. Bukowski, J. Noworól, A. Drelinkiewicz, A. Knapik, A. Waksmundzka-Góra "Reactive Methacrylic Gels as Supports for Transition Metal Catalysts", Proc. 70<sup>th</sup> Prague Meeting on Macromolecules, Prague 2007
22. A. Burkat, M. Derewiński "Preparation of New Zeolite Supports for Bifunctional (Acid/redox) Catalysts", Book of Abstracts. 2<sup>nd</sup> Int. Symp. Advanced Micro- and Mesoporous Materials, Varna 2007 (eds. H. Aleksandrov, G. Petrova, G. Vayssilov), Sofia 2007, p.151
23. A. Burkat, V. Valtchev, M. Derewiński "Preparatyka materiałów mikro-/makroporowatych przy wykorzystaniu zawiesin koloidalnych anionowych lateksów polistyrenowych oraz nanokryształów zeolite typu BEA", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.292-293 [ISBN 978-83-60514-04-7]

24. D. Dronka-Góra, K. Szczepanowicz, G. Para, P. Warszyński "Interfacial Properties of Chloroform-teos and Chloroform-aps Surfactant Solution Systems", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.58
25. D. Dronka-Góra, K. Szczepanowicz, G. Para, P. Warszyński "Napięcie międzyfazowe układów chloroform-TEOS i chloroform-APS w roztworach surfaktantów - Interfacial tension in chloroform-teos and chloroform-aps / surfactant solution systems", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.167
26. R. Dula, R. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "Supported and Unsupported Mn-Containing LDHs-derived Materials for the Total Oxidation of VOCs", Proc. AWPA 2007 Symp. on Air and Water Pollution Abatement, Zakopane 2007, p.125-126
27. R. Dula, J. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "The Effect of Mn-Doping Manner on Properties of Supported and Unsupported Materials for the Catalytic Combustion of VOCs", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P13-100
28. R. Dula, D. Mucha, B. Napruszewska, E. M. Serwicka "Nowa procedura syntezy oraz właściwości fizykochemiczne związków typu hydrotalkitu interkalowanych anionami  $MnO_4^-$ ", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p. 294-295 [ISBN 978-83-60514-04-7]
29. R. Dula, D. Mucha, B. Napruszewska, R. Socha, E. M. Serwicka "Synteza i ewolucja termiczna związków typu hydrotalkitu zawierających jako metale strukturotwórcze Cu, Mn i Al", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.20-21 [ISBN 978-83-60514-04-7]
30. R. Dula, M. Zimowska, J. Plona, B. Napruszewska, R. Socha, J. Gurgul, E. M. Serwicka "Synthesis and Thermal Evolution of Cu-Mn-Al Hydrotalcite-like Compounds", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P2-155
31. D. Duraczyńska, E. M. Serwicka, A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz "Osadzanie fosfonowego kompleksu Ru(II) na mezoporowatej krzemionce typu HMS. Badania katalityczne w reakcji uwodorniania fenylacetyleny", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.22-23 [ISBN 978-83-60514-04-7]
32. D. Duraczyńska, E. M. Serwicka, A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz "Immobilization of Hemilabile Ru(II) Complex onto Hexagonal Mesoporous Silica (HMS) and Its Catalytic Application", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P-5-98
33. M. Elżbieciak, M. Kolasieńska, P. Warszyński "Dependence of Thickness and Wetting of Polyelectrolyte Multilayer Films on the Nature of Polyions", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.59

34. M. Elżbieciak, M. Kolasińska, P. Warszyński "Characteristics of Polyelectrolyte Multilayers: the Effect of Polyion Charge on Thickness and Wetting properties", Book of Abstracts. 12<sup>th</sup> Int. Conf. Organized Molecular Films (LB-12), Kraków 2007, Mo-P-17.
35. U. Filek, B. Sulikowski, A. Brückner "Heteropolyacids Salts as Catalysts for the Oxidation of Norbornene", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.369 [ISBN 978-83-60514-04-7]
36. U. Filek, B. Sulikowski, M. Hunger "A <sup>31</sup>P MAS NMR Study of the Aluminium, Gallium and Indium Salts of Various Heteropolyacids", Report No. 2002/AP of the Institute of Nuclear Physics PAS, Kraków, p.17
37. J. Goclon, R. Gryboś, M. Witko "Reduced (010), (001) and (100)V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Surfaces – Periodic DFT Study", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.251-252 [ISBN 978-83-60514-04-7]
38. J. Goclon, R. Gryboś, M. Witko "Reduced (010), (001) and (100) V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Surfaces – Periodic DFT Studies", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P1-48
39. A. Góra, D. A. Pacheco Tanaka, F. Mizukami, T. M. Suzuki "The Stability of the Pore Fill Type Palladium Membrane in Low Temperature Dehydrogenation of Methylocyclohexane", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.29 [ISBN 978-83-60514-04-7]
40. B. Grzybowska-Świerkosz, M. Ruszel "Nano Au/oxide Support Systems in Catalytic Oxidation", Book of Abstracts. E-MRS Fall Meeting, Warszawa, 2007, p.292
41. M. Grzywa, B. Gawęł, W. Nitek, M. Lincner, J. Ryś, A. Rafalska-Łasocho, W. Łasocho "Badania strukturalne i fizykochemiczne nowych polimolibdenianów amin", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.303 [ISBN 978-83-60514-04-7]
42. J. Gurgul, K. Łątka, A. W. Pacyna, Y. Verbovytsky, R. Pöttgen "Hyperfine Interactions Studied by <sup>119</sup>Sn Mössbauer Spectroscopy in SmRhSn", Book of Abstracts. Int.Conf. on the Applications of the Mössbauer Effect ICAME'07, Kanpur 2007
43. J. Haber, T. Machej, M. Nattich "Katalityczny rozkład tlenku azotu (I)", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.210 [ISBN 978-83-60514-04-7]
44. J. Haber, T. Machej, M. Nattich "Influence of NO and O<sub>2</sub> on Activity of Rhodium Catalyst in Decomposition of N<sub>2</sub>O", Proc. AWPA 2007 Symp. on Air and Water Pollution Abatement, Zakopane 2007, p.163
45. J. Haber, P. Nowak, R. P. Socha, P. Żurek "Enhancing the Electrocatalytic Activity of TiO<sub>2</sub> by Surface Doping with Transition Metals", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P17-53

46. P. Hejduk, M. Witko, J. Korecki, N. Spiridis "Au and Ag Adsorption at Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001) Surface: DFT Cluster Study", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IKiFP PAN Kraków 2007, p.254-255 [ISBN 978-83-60514-04-7]
47. P. Hejduk, M. Witko "Amونيا Adsorption at Low-indices V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Surfaces: DFT Cluster Study", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IKiFP PAN Kraków 2007, p. 253 [ISBN 978-83-60514-04-7]
48. P. Hejduk, M. Witko "The Role of V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Low-indices Surfaces in SCR Mechanism – Cluster DFT Study of Ammonia Adsorption", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, O1-6
49. P. Hejduk, M. Witko "Amونيا Activation at Low-indices V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Surfaces in the SCR of NO<sub>x</sub>: DFT Cluster Study", Proc. AWWPA 2007 Symp. on Air and Water Pollution Abatement, Zakopane 2007, p.81
50. P. Hejduk, M. Witko "Amونيا Activation at Low-indices V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Surfaces in SCR Reaction – Cluster DFT Study", Posters. IDECAT Conf. of Catalysis 'Concepts, Complexity and Diversity in Catalysis', Porquerolles 2007, p.30-31
51. A. B. Hendrich, K. Pamin, J. Połtowicz "Zastosowanie znaczników fluorescencyjnych DiOC<sub>6</sub>, TMA-DPH i DPH w badaniach nad oddziaływaniem metaloporfiryn z dwuwarstwami lipidowymi", Current Topics in Biophysics (Suppl. B), 30 (2007) B31
52. B. Jachimska, Z. Adamczyk, A. Karwiński "Characterization of Polyelectrolyte Layers by the Streaming Potential Method", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.69
53. B. Jachimska, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Characterization of Anisotropic Molecules: Polyelectrolytes and Proteins", Proc. ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007, p.275
54. B. Jachimska, Z. Adamczyk, P. Warszyński, T. Jasiński, M. Wasilewska "Tailoring Polyelectrolyte Structure to Designing Surface for Control Protein Adsorption", Proc. 19<sup>th</sup> Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, Toulouse 2007, p.202
55. B. Jachimska, Z. Adamczyk, P. Warszyński, T. Jasiński, M. Wasilewska "Tailoring Polyelectrolyte Structure to Designing Surface for Control Protein Adsorption", Proc. 19<sup>th</sup> Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, Toulouse 2007, p.201
56. B. Jachimska, Z. Adamczyk, M. Wasilewska "Charakterystyka polielektrolitów oraz białek w roztworach wodnych", Mater. I Krajowej Konf. Nanotechnologii, Wrocław 2007, p.55
57. B. Jachimska, Z. Adamczyk, M. Wasilewska, M. Piotrkowski "Characterization of Globular Proteins", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.71

58. B. Jachimska, Z. Adamczyk, M. Wasilewska, K. Szatkowska, G. Para "Bulk and Wetting Characteristics of Globular Proteins", Proc. ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007, p.180
59. B. Jachimska, T. Jasiński, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Chain Conformation of Linear Weak Polyelectrolyte Molecules in Electrolyte Solution: Poly(allylamine hydrochloride)", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.43
60. B. Jachimska, M. Kolasińska, K. Pamin, J. Połtowicz, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Interaction of Metallocomplexes with Polyelectrolyte Multilayer (Chitosan/alginate)", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.70
61. B. Jachimska, K. Onik, J. Połtowicz, K. Pamin, Z. Adamczyk, P. Warszyński, R. Grabowski, "Makrocykliczne kompleksy imobilizowane na chitanie jako katalizatory utleniania cykloalkanów - Macrocyclic Complex Immobilized on Chitosan as Catalysts of Cycloalkanes Oxidation", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.168
62. B. Jachimska, K. Pamin, J. Połtowicz, M. Kolasińska, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Surface Tailoring for Immobilization of Macrocyclic Complexes: Investigation of Physico-Chemical Properties", Proc. 19<sup>th</sup> Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, Toulouse 2007, p.201
63. B. Jachimska, J. Połtowicz, K. Pamin, Z. Adamczyk "Interaction of Metallocomplexes with Polymers (Polyelectrolytes, PAMAM Dendrimers) in Aqueous Solution", Proc. ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007, p.276
64. B. Jachimska, K. Pamin, J. Połtowicz, M. Kolasińska, Z. Adamczyk, P. Warszyński, "Electrostatic Immobilization of Macrocyclic Complexes by Adsorption on the External Surface of Multilayer Film: Investigation of Physico-chemical Properties", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IKiFP PAN Kraków 2007, p.308 [ISBN 978-83-60514-04-7]
65. B. Jachimska, M. Wasilewska, K. Szatkowska, Z. Adamczyk, G. Para "Fizykochemiczna charakterystyka białek w objętości i strukturalne przegrupowanie na powierzchni - Protein Physicochemical Characterization in the Bulk Solution and Structural Rearrangements at the Surface", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.169
66. J. Janas, T. Machej, M. Che, S. Dźwigaj "Effect of the Nature of Co Species on the Catalytic Activity of CoSiBEA Zeolite in the SCR of NO", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IKiFP PAN Kraków 2007, p.24 [ISBN 978-83-60514-04-7]

67. J. Janas, T. Machej, M. Che, S. Dźwigaj "State of Cobalt in CoSiBEA Zeolite and Its Role in NO SCR with Ethanol", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007
68. J. Janas, T. Machej, M. Che, S. Dźwigaj "Effect of the Nature of Co Species on the Catalytic Activity of CoSiBEA Zeolite in the SCR of NO by Ethanol", Proc. Int. Annual Meeting on Catalysis for Environment: Depollution, Renewable Energy and Clean Fuels, Zakopane 2007, p.1-5
69. J. Janas, T. Machej, J. Gurgul, R. P. Socha, M. Che, S. Dźwigaj "Effect of the Nature of Co Species on the Catalytic Activity of CoSiBEA Zeolite in SCR of NO by Ethanol", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P14-62
70. T. Jasiński, F. Cuisinier, P. Warszyński, B. Jachimska, Z. Adamczyk "Chain Conformation of Poly(allylamine hydrochloride) in Electrolyte Solutions Obtained from Molecular Modeling and Viscosity Measurements", Book of Abstracts. 11<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interface Phenomena and Their Technological Applications, Zamość 2007 [ISBN 978-83-227-2717-1]
71. K. Jaszczólt, Z. Adamczyk, P. Weroński "Kinetics of Particle Deposition on Heterogeneous Surfaces", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.73
72. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Sole tetrabutylamoniowe lakunarnych heteropolikwasów jako katalizatory utleniania fenoli", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.171
73. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Liquid Phase Phenol Oxidation in the Presence of Different Salts of Heteropolyacids", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P5-100
74. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Utlenianie cyklooktanu w obecności soli kwasu fosforowolframowego z jonami metali przejściowych wprowadzonymi w pozycję addenda" Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.185 [ISBN 978-83-60514-04-7]
75. H. Karhu, D. Chichova, R. P. Socha, I. J. Väyrynen "Co-adsorption of Carbon Monoxide and Nitric Oxide on Platinum Single Crystal Surfaces", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P3-9
76. T. Kasza, A. Stokłosa "Wpływ właściwości fizykochemicznych nośników na aktywność fotokatalityczną osadzonych na nich cienkich warstw TiO<sub>2</sub>", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.78-79 [ISBN 978-83-60514-04-7]
77. A. Klisińska-Kopacz, E. M. Gaigneaux "Effect of the Nature of the Precursor on the Morphology of MoO<sub>3</sub> Thin Films Spin-coated on Si(100)", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.309-310 [ISBN 978-83-60514-04-7]

78. A. Klisińska-Kopacz, E. M. Gaigneaux "Efficient Way of Bismuth, Cobalt and Nickel Molybdates Model Catalysts Preparation by Spin-coating", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.311-312 [ISBN 978-83-60514-04-7]
79. A. Knapik, A. Waksmundzka-Góra, A. Bukowska, W. Bukowski, J. Noworól, A. Drelinkiewicz "Pd-Gel Type Functional Resins, the Catalysts for Hydrogenation of Regents with Unsaturated C≡C and C=C Bonds", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.82-83 [ISBN 978-83-60514-04-7]
80. A. Knapik, A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz, J. Noworól, A. Bukowska, W. Bukowski "Pd-funkcjonalizowane żywice – katalizatory dla uwodorniania alkynów", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.168
81. A. Knapik, A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz, J. Noworól, A. Bukowska, W. Bukowski "Functional Gel-type Resin – Pd Catalysts for Hydrogenation of Alkyne Reagents", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P5-43
82. J. Korecki "Dynamyc - Some Facts and Figures", Programme-Abstracts. Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007, p.15
83. J. Korecki "Małe jest inne: nanocząstki złota i ich niezwykle właściwości", Program i streszczenia. 39. Zjazd Fizyków Polskich, Szczecin 2007, p.36
84. A. Kowal, Kug-Seung, Sung Jong Yoo, P. Olszewski, Jung-Eun Sung "Synthesis and Properties of Pt-Rh, Pt-SnO<sub>2</sub> and Pt-Rh-SnO<sub>2</sub> Electrocatalysts for Etanol Oxidation", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.313-314 [ISBN 978-83-60514-04-7]
85. M. Krasowska, M. Kolasińska, P. Warszyński, K. Małysa, R. Pushkarova, R. Horn "Effect of Hydrophobicity and Surface Charge on Wetting and Time-Scale of Attachment of Bubbles to Solids", Program and Abstracts. Australian Colloid and Interface Symp. ACIS2007, Sydney 2007, p.99
86. A. Krowiak, W. Turek, J. Haber "Ocena mocy centrów kwasowych na podstawie reakcji dehydratacji alkoholu izopropylowego do propenu - Evaluation of Strength of Acid Centres on the Basis of Isopropyl Alcohol Dehydration to Propene", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.172
87. A. Król, J. W. Sobczak, A. Drelinkiewicz "Katalityczne właściwości Pd-polianilina i Pd/poli(4-winylopirydyna) w uwodornianiu 2-butyn-1,4-diolu", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.88 [ISBN 978-83-60514-04-7]

88. A. Król, A. Waksmundzka-Góra, A. Zięba, J. W. Sobczak, A. Drelinkiewicz "Polyaniline and Poly(4-vinylpyridine) Supported Pd and Pt Catalysts. Role of Polymer in Hydrogenation of 2-Butyne-1,4-diol", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P5-42
89. A. Kubacka, J. Janas, E. Włoch, B. Sulikowski "Selective Catalytic Reduction of Nitrogen Oxide Using Methane on Ferrierite Catalysts", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p 402 [ISBN 978-83-60514-04-7]
90. A. Kubacka, B. Sulikowski, Z. Wang, V. Cortés Corberán "Direct Oxidation of Benzene to Phenol in the Presence of O<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> over Pd- and Pt(V)MCM-41", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P15-52.
91. E. Kukulska-Zajac, P. Kozyra, I. Dźwigaj, J. Załucka, E. Broclawik, J. Datka "Properties of Ag<sup>+</sup> Ions in Zeolites and Their Interaction with Adsorbed Molecules. IR study and DFT Calculations", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007, p.1635
92. W. Łasocha, A. Rafalska-Łasocha, M. Grzywa, B. Gawel "New Achievements in X-Ray Techniques in the Investigations of Catalyst", Proc. AWPA 2007 Symp. on Air and Water Pollution Abatement, Zakopane 2007
93. K. Łatka, J. Gurgul, A. W. Pacyna, Y. Verbovytsky, R. Pöttgen "Mössbauer and Magnetic Characterization of TbRhSn", Book of Abstracts. Int.Conf. on the Applications of the Mössbauer Effect ICAME'07, Kanpur 2007
94. J. Łojewska, A. Lubańska, P. Miśkowiec "Model autokatalitycznej degradacji celulozy. Badania metodą in situ FTIR", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.39 [ISBN 978-83-60514-04-7]
95. A. Łukaszczyk, E. Włoch, Z. Żurek, B. Sulikowski "Synthesis of Ferrierite Coatings on the FeCrAl Steel Substrate", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.383-385 [ISBN 978-83-60514-04-7]
96. T. Machej, R. Janik, J. Lenard, H. Sadowska, B. Napruszewska, E. Serwicka-Bahranowska, M. Zimowska "Katalizator monolityczny do neutralizacji zanieczyszczeń organicznych", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.216 [ISBN 978-83-60514-04-7]
97. T. Machej, R. Janik, H. Sadowska, E. Serwicka-Bahranowska, K. Bahranowski, W. Włodarczyk "Katalizator do pełnego utleniania chlorowcopochodnych", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.214 [ISBN 978-83-60514-04-7]
98. K. Małysa, M. Krasowska "Nanobubbles and the Three Phase Contact Formation at Hydrophobic Surfaces", Abstract. Conf. NPCIS 2007 Nanoscale Phenomena in Colloid and Interface Science, Plovdiv 2007, p.9



99. D. Mentel, T. Machej, J. Janas, W. Rojek, M. Najbar "Badanie redukcji NO węglowodorami aromatycznymi i alifatycznymi na katalizatorze 0.06Rh/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> w obecności tlenu", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.219 [ISBN 978-83-60514-04-7]
100. D. Mentel, T. Machej, J. Janas, W. Rojek, M. Najbar "HC-SCR of NO over Alumina Supported Rhodium Catalyst of Low Loading", Proc. AWWPA 2007 Symp. on Air and Water Pollution Abatement, Zakopane 2007, p.91-92
101. A. Micek-Ilnicka "Gas Phase Synthesis of Ethyl-tert-butyl ether (ETBE) in the System: Ethanol, Isobutene and Water on Heteropolyacid H<sub>6</sub>P<sub>2</sub>W<sub>18</sub>O<sub>62</sub> as the Catalyst", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P-12-22
102. A. Micek-Ilnicka "Kinetyka i mechanizm syntezy eteru etylo-tert-butyłowego na heteropolikwasie H<sub>6</sub>P<sub>2</sub>W<sub>18</sub>O<sub>62</sub> w obecności wody w fazie gazowej", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.104 [ISBN 978-83-60514-04-7]
103. A. Micek-Ilnicka, B. Gil, E. Lalik "Sole diamonowe w strukturach heteropolikwasów – zastosowanie technik grawimetrycznej, FTIR i mikrokalorymetrii", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.42 [ISBN 978-83-60514-04-7]
104. A. Michna, M. Szaraniec, Z. Adamczyk "Characterization of Polyelectrolyte Layers by the Streaming Potential Method", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.82
105. Ł. Mokrzycki, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Isomerization of  $\alpha$ -Pinene over ZSM-12, ZSM-5 and MCM-22 Zeolites", Report No. 2002/AP of the Institute of Nuclear Physics PAS, Kraków, p.46
106. Ł. Mokrzycki, B. Sulikowski "Dealumination of Zeolite Y Using H<sub>4</sub>EDTA and Its Properties in the Isomerization of  $\alpha$ -Pinene", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.54-55 [ISBN 978-83-60514-04-7]
107. M. Nattich, J. Haber, T. Machej "Modyfikacja katalizatora rodowego w reakcji rozkładu tlenku azotu (I)", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.243.
108. M. Nowakowska, K. Rosół, K. Szczubiałka, B. Jachimska, Sz. Zapotoczny "Removal of Anionic Surfactants from Water Using Cationic Polyelectrolytes", Proc. ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007, p.147
109. A. Pacuła, J. Kryściak-Czerwenka, K. Pamin, E. M. Serwicka "Porównanie właściwości fizykochemicznych i katalitycznych układów zawierających H<sub>3</sub>PW<sub>12</sub>O<sub>40</sub> osadzony na wodorowej formie montmorillonitu", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p. 333-334 [ISBN 978-83-60514-04-7]

110. A. Pacuła, R. Mokaya "Preparation of N-Doped Carbon Materials via Chemical Vapour Deposition (CVD) Method", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.280
111. A. Pacuła, R. Mokaya "Hydrogen Storage Capacity of Carbon Materials Prepared via Chemical Vapour Deposition Using As-synthesised Zeolite  $\beta$  as Template", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P11-84
112. A. Pacuła, R. Mokaya "Synthesis of Porous Carbon Materials via Chemical Vapour Deposition Using As-synthesized Zeolite  $\beta$  as Template", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p. 331-332 [ISBN 978-83-60514-04-7]
113. K. Pamin, J. Połtowicz "Makrocykliczne kompleksy metali przejściowych jako katalizatory reakcji epoksydacji olefin", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.162
114. K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Wpływ monopodstawionej metalami przejściowymi struktury lakularnej kwasu na aktywność i selektywność reakcji utleniania węglowodorów cyklicznych", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.190 [ISBN 978-83-60514-04-7]
115. K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Epoxidation of Olefins Catalyzed by Monosubstitued Polyoxometalates", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P5-99
116. T. Pańczyk, W. Rudziński "Analysis of the Adsorption Kinetics of Nitrogen on Fe(100) and Fe(111) Based on Applying the Statistical Rate Theory", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.51 [ISBN 978-83-60514-04-7]
117. G. Para, J. Węgrzyńska, K. A. Wilk, P. Warszyński "Effect of Multiple Charge in Adsorption of Cationic Surfactants", Proc. ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007, p.59
118. G. Para, J. Węgrzyńska, K. A. Wilk, P. Warszyński "Adsorption of Multiple Cationic Surfactants at Air/solution Interface", Proc. 9<sup>th</sup> Conf. on Colloid Chemistry, Siofok 2007, p.10
119. E. Partyka-Janowska, B. Sepioł, M. Śladecek, D. Kmiec, J. Korecki, T. Ślęzak, M. Zając, R. Ruffer, S. Stankov, G. Vogl "Nuclear Resonant Scattering Studies of Relaxation in Fe-Monolayer on W(110)", Programme-Abstracts. Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007, p.107
120. V. Pashkova, M. Derewiński "Preparation of New Acid Type Catalysts Containing Nanoclusters of Zeolites (FAU, BEA) Dispersed in Amorphous Matrix", Book of Abstracts. 2<sup>nd</sup> Int. Symp. Advanced Micro- and Mesoporous Materials, Varna 2007 (eds. H. Aleksandrov, G. Petrova, G. Vayssilov), Sofia 2007, p.35

121. V. Pashkova, M. Derewiński "Synteza i charakterystyka układów kompozytowych BEA/amorficzny glinokrzemian", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.388 [ISBN 978-83-60514-04-7]
122. V. Pashkova, M. Derewiński "Synteza i charakterystyka układów kompozytowych zeolit/porowaty glinokrzemian, otrzymanych na drodze częściowej rekrytalizacji amorficznych ścianek glinokrzemianu", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.52-53 [ISBN 978-83-60514-04-7]
123. J. Plona, M. Zimowska, R. Janik, T. Machej, E. Serwicka-Bahranowska "Nanostrukturalne katalizatory na osnowie tlenków miedzi i manganu do usuwania lotnych zanieczyszczeń organicznych", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.229 [ISBN 978-83-60514-04-7]
124. J. Połtowicz, K. Pamin, P. Staszyński, J. Haber, J. Noworól, W. Bukowski "Badanie właściwości katalitycznych manganowych kompleksów salenowych w reakcji utleniania związków alochtonicznych", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.231 [ISBN 978-83-60514-04-7]
125. J. Połtowicz, K. Pamin, P. Staszyński, J. Haber, J. Noworól, W. Bukowski "Oxidative Degradation of Aromatic Pollutant in Presence of Manganese Salen Complexes", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, O13-13
126. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, J. Haber "Influence of Substituents in Metallophthalocyanine Complexes on Their Catalytic and Electrochemical Properties in Oxidation of Cycloalkanes", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P5-101
127. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, J. Haber "Badanie aktywności katalitycznej ftalocyjanin kobaltu, żelaza i manganu fizykochemicznych różnymi podstawnikami fizykochemicznych pierścieniu fizykochemicznych reakcji utleniania węglowodorów tlenem molekularnym", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.192 [ISBN 978-83-60514-04-7]
128. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, G. Pozzi, J. Haber "Synteza i określenie właściwości katalitycznych perfluorowanych kompleksów salenowych", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.101
129. R. Rachwalik, M. Hunger, B. Sulikowski "Transformations of  $\alpha$ -Pinene over Dealuminated Medium-pore Zeolite", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.54-55 [ISBN 978-83-60514-04-7]

130. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Alumination of Ferrierite: Its Influence on the Physicochemical and Catalytic Properties", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.137-138 [ISBN 978-83-60514-04-7]
131. R. Rachwalik, B. Sulikowski "How the Silanization Affects Catalytic Properties of Zeolite L ?", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p136 [ISBN 978-83-60514-04-7]
132. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Modern Applications of X-Rays in the Investigations of Art Objects", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.259
133. A. Rafalska-Łasocha, W. Nitek, M. Grzywa, B. Gawęł, W. Łasocha "Synthesis and structural Investigations of Organoammonium Octamolybdates", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.173
134. R. Reitingner, B. Pfau, L.-M. Stadler, S. Stankov, M. Zając, N. Spiridis, B. Sepioł, F. Zontone, J. Korecki, G. Vogl "GISAXC and XPCS Studies of Islands Growth", Programme-Abstracts. Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007, p.109
135. R. Reitingner, B. Pfau, L.-M. Stadler, S. Stankov, F. Zontone, N. Spiridis, B. Sepioł, J. Korecki, G. Vogl "Surface Diffusion and Island Growth of Metal Films on Oxide Substrates", Abstracts. 57. Jahrestagung der Österreichischen Physikalischen Gesellschaft, Krems 2007, p.76
136. P. Rejmak, E. Broclawik "NO Molecule Interaction with Cu(I) Sites in Faujasite-combined Quantum Mechanics/molecular Mechanics study", Book of Abstracts. 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007, p.1635
137. K. Rosół, K. Szczubiałka, Sz. Zapotoczny, B. Jachimska, M. Nowakowska "Novel Smart Cationic Polyelectrolyte Based on a Hydroxypropylcellulose - Interactions with an Anionic Surfactant", Book of Abstracts. 3<sup>rd</sup> Young European Scientists Workshop YES 2007, Kraków 2007
138. W. Rudziński, T. Pańczyk, T. P. Warzocha "Collision Frequency of Ideal Gas Particles with Irregular Surfaces as a Function of Their Fractal Dimension. Molecular Dynamic Studies", Book of Abstracts. 11<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interface Phenomena and Their Technological Applications, Zamość 2007, p.122 [ISBN 978-83-227-2717-1]
139. W. Rudziński, W. Płaziński "Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications", Book of Abstracts. 11<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interface Phenomena and Their Technological Applications, Zamość 2007, p.123 [ISBN 978-83-227-2717-1]

140. M. Ruszel, B. Grzybowska, M. Łaniecki, M. Wójtowski "Nanocząstki Au/Ti-silikality-SBA-15 jako katalizatory reakcji utleniania CO i węglowodorów C<sub>3</sub>", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.56 [ISBN 978-83-60514-04-7]
141. M. Ruszel, B. Grzybowska, M. Łaniecki, M. Wójtowski "Au Nanoparticles Dispersed on Ti-SBA-15 Supports as the Catalysts in Oxidation of CO and of C<sub>3</sub> Hydrocarbons", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P2-8
142. D. Rutkowska-Żbik, T. H. Rod, U. Ryde "Opracowanie metodologii teoretycznego wyznaczania wartości pKa i potencjału redox w proteinach", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p. 263-264 [ISBN 978-83-60514-04-7]
143. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, G. Stochel "Pochodne chlorofilu – badania właściwości katalitycznych i przydatności do terapii fotodynamicznej", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p. 261-262 [ISBN 978-83-60514-04-7]
144. K. Samson, I. Gressel, B. Grzybowska-Świerkosz, A. Kotarba, M. Hermanowska "Utleniające odwodornienie izobutanu na domieszkowanych potasem układach tlenków chromu i wanadu na nośnikach tlenkowych", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.143 [ISBN 978-83-60514-04-7]
145. K. Samson, B. Grzybowska, M. A. Bañares, E. Lozano Diz, J. Słoczyński, A. Kotarba, M. Hermanowska "Effect of Potassium Addition to CrO<sub>x</sub>/oxide Support Catalysts on Their Physicochemical and Catalytic Properties in Oxidative Dehydrogenation of Isobutene", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, O19-2
146. J. Słoczyński, R. Grabowski, A. Kozłowska, M. Śliwa "Interaction of Oxygen with the Surface of Vanadia Catalysts", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.147-148 [ISBN 978-83-60514-04-7]
147. R P. Socha, A. V. Tripković, P. Nowak, A. Kowal "Surface Composition of PtBi Electrode Cycled in Sulfuric Acid", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P3-73
148. N. Spiridis, K. Freindl, K. Matlak, R. Socha, T. Ślęzak, M. Ślęzak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, J. Korecki "Nanostruktury metali na powierzchniach wycyalnych", Mater. I Krajowej Konf. Nanotechnologii, Wrocław 2007, p.10
149. N. Spiridis, K. Freindl, T. Ślęzak, M. Ślęzak, M. Zając, J. Korecki "Fe Nanostructures on W(110) and W(540)", Programme-Abstracts. Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007, p.97

150. L. Stadler, B. Pfau, B. Sepioł, R. Reitinger, S. Stankov, M. Zając, N. Spiridis, J. Korecki, F. Zontone, G. Vogl "Anisotropic Coarsening Dynamics Revealed by X-ray Photon Correlation Spectroscopy", Programme-Abstracts. Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007, p.33
151. S. Stankov, R. Röhlberger, T. Ślęzak, M. Sladeczek, B. Sepioł, G. Vogl, A. I. Chumakov, R. Rüffer, N. Spiridis, J. Łażewski, K. Parliński, J. Korecki "Phonons: from Bulk to Monolayers", Programme-Abstracts. Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007, p.21
152. J. Stawowska, W. M. Bartczak, A. Drelinkiewicz "Investigation of the Palladium-polyaniline System with the Methods of Computational Chemistry", Book of Abstracts. 11<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interface Phenomena and Their Technological Applications, Zamość 2007 [ISBN 978-83-227-2717-1]
153. J. Stawowska, W. M. Bartczak, A. Drelinkiewicz "Investigation of the Palladium-polyaniline System with the Methods of Computational Chemistry", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P5-44
154. J. Stawowska, W. M. Bartczak, A. Drelinkiewicz "Investigation of the Palladium-4-vinylpyridine and Palladium-poly(4-vinylpyridine) Systems with the Methods of Computational Chemistry", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P5-45
155. A. Struska, D. Wodka, P. Nowak "Electrocatalytic Properties of Titanium Dioxide Gels Doped with Nickel Ions. Comparison with Nickel Hydroxide", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
156. M. Szaleniec, T. Borowski, M. Witko, J. Heider "The Anaerobic Oxidation of Ethylbenzene by Ethylbenzene Dehydrogenase – Modeling of the Mechanism", Materials Conference. 3<sup>rd</sup> Symposium on Theoretical Biophysics TheoBio-07, Cetraro 2007
157. M. Szaleniec, P. Nowak, R. Tadeusiewicz, M. Witko, J. Heider "Ethylbenzene Dehydrogenase – the Mechanism of Biocatalytic Oxidation of Alkylaromatic and Alkylheterocyclic Compounds", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p. 49-50 [ISBN 978-83-60514-04-7]
158. M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider "Ethylbenzene Dehydrogenase – Biosynthesis of Secondary Alkylaromatic and Alkylheterocyclic Alcohols", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P6-10
159. M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider "Ethylbenzene Dehydrogenase – Biosynthesis of Secondary Alkylaromatic and Alkylheterocyclic Alcohols", Abstracts. Int. Symp. on Relation between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC XIII, Berkeley 2007, p.164

160. K. Szczepanowicz, D. Dronka-Góra, G. Para, A. M. Bouzga, C. Simon, P. Warszyński "Emulsion Containing Silica Sources as Cores for Microencapsulation", Proc. ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007, p.253
161. K. Szczepanowicz, D. Dronka-Góra, G. Para, A. M. Bouzga, C. Simon, P. Warszyński "Micro and Miniemulsions in teos or aps Chloroform Systems as Cores for Capsules with Silica Shells", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.50
162. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, P. Warszyński "Permeability of Polyelectrolyte Shells for Fluorescein cContaining Microcapsules Suspended in Solution and aAttached to a Surface", Proc. 9<sup>th</sup> Conf. on Colloid Chemistry, Siofok 2007, p.149
163. T. Ślęzak, A. I. Chumakov, K. Freindl, K. Matlak, J. Meersschat, E. Partyka, N. Planckaert, M. Rennhofer, R. Ruffer, B. Sepioł, M. Ślęzak, N. Spiridis, S. Stankov, M. Zając, J. Korecki "Growth and Spin Structure of Ultrathin Fe Films on W(110)", Programme-Abstracts. Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007, p.63
164. T. Ślęzak, M. Zając, M. Ślęzak, K. Matlak, W. Karaś, N. Spiridis, K. Freindl, D. Wilgocka-Ślęzak, S. Stankov, R. Ruffer, J. Korecki "Magnetism of Ultrathin Iron Films Seen by the Nuclear Resonant Scattering of Synchrotron Radiation", Abstracts. Scientific Network 'New Materials for Magnetoelectronics' MAG-EL-MAT, Będlewo 2007, p.20
165. E. Tabor, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Comparison of Catalytic Activity of Monomeric Metallorhorphyrins, Their  $\mu$ -Oxo Analogues and Supported Complexes in Oxidation of Cyclooctane", Abstracts. Int. Symp. on Relation between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC XIII, Berkeley 2007, p.230
166. E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, P. Nowak, J. Haber "Wpływ struktury i właściwości elektrochemicznych metaloporfiryn na ich właściwości katalityczne w reakcji utleniania cyklooktanu", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.195 [ISBN 978-83-60514-04-7]
167. E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, G. Pozzi, J. Haber "Synthesis and Physico-chemical Characterization of Perfluoroalkylated Salen Complexes", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.351 [ISBN 978-83-60514-04-7]
168. R. Todorov, J. Zawała, K. Małysa, D. Exerowa "Foam Films from Serum Albumine", Abstract. Conf. NPCIS 2007 Nanoscale Phenomena in Colloid and Interface Science, Plovdiv 2007, p.56
169. R. Tokarz-Sobieraj "Theoretical Description of Molybdena Based Catalysts; DFT Cluster Model Study", Abstracts. 20<sup>th</sup> North American Catalysis Society Meeting, Houston 2007

170. R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś, M. Witko "Electronic Structure of MoO<sub>2</sub>. DFT Periodic and Cluster Studies", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P1-44
171. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Influence of Mo Coordination on Oxygen Activation in Hetero and Homogeneous Catalysts. DFT Cluster Model Studies", Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, (4) (2007), p.563
172. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Wpływ liganda i stopnia utlenienia Mo na proces aktywacji tlenu na porfirynach molibdenowych", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IKiFP PAN Kraków 2007, p. 279-280 [ISBN 978-83-60514-04-7]
173. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "DFT Cluster Model Studies of Oxygen Activation at Molybdenum Porphyrins and Molybdenum Trioxide", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P1-45
174. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Deposition of Model Microcapsules at Solid Surfaces", Proc. 9<sup>th</sup> Conf. on Colloid Chemistry, Siofok 2007, p.64
175. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Permeability of Polyelectrolyte Shells of Fluorescein Containing Microcapsules Suspended in Solution and Attached to a Surface", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.89
176. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Deposition of Fluorescently Labelled Model Microcapsules at Various Solid-liquid Interfaces", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.47
177. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Permeability of Polyelectrolyte Shells for Fluorescein Containing Microcapsules Suspended in Solution and Attached to a Surface", Proc. ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007, p.267
178. A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz, J. W. Sobczak, J. Stejskal "Hydrogenation of 2-Ethylanthraquinone on Pd-Polyaniline (SiO<sub>2</sub>)-Composites", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P5-41
179. A. Waksmundzka-Góra, A. Zięba, A. Knapik, J. W. Sobczak, A. Drelinkiewicz "Fizykochemiczne i katalityczne właściwości układów Pt-polianilina i Pt-poli(4-winylopirydyna)", XXIX Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 14 – 16.03.2007, Kraków
180. P. Warszyński, E. Jarek, G. Para, T. Jasiński "Adsorption of Ionic and Nonionic Surfactants – Differences and Similarities", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.40



181. T. P. Warzocha, T. Pańczyk, W. Rudziński "Zależność częstotliwości zderzeń molekul gazu doskonałego z powierzchnią od jej nieregularności", Mater. 50. Jubileuszowego Zjazdu PTChem i SITPCChem oraz 11<sup>th</sup> Int. Conf. on Chemistry and the Environment ICCE-DCE'07, Toruń 2007, p.163
182. T. Warzocha, T. Pańczyk, W. Rudziński "Molecular Dynamics Study on Equilibrium Flux of Ideal Gas Molecules to Fractal Surface", Mater. Zjazdu Wiosennego Sekcji Studenckiej PTChem, Tylmanowa 2007, p.87 [ISBN: 83-920343-6-8]
183. E. Wenda, A. Bielański "Diagram fazowy układu  $V_2O_5$ - $MoO_3$ - $Ag_2O$ ", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IKiFP PAN Kraków 2007, p.396 [ISBN 978-83-60514-04-7]
184. P. Weroński, Z. Jiang, S. Rasmussen "Application of Molecular Dynamics Simulations in the Design of a Minimal Self-Replicating Molecular Machine", Proc. 27<sup>th</sup> Annual CNLS Conf. Complexity of Biological and Soft Materials, Santa Fe, 2007
185. P. Weroński, Z. Jiang, S. Rasmussen "Application of Molecular Dynamics Simulations in the Design of a Minimal Self-Replicating Molecular Machine", Proc. 4<sup>th</sup> Annual Conf. on Foundations of Nanoscience: Self-Assembled Architectures and Devices FNANO'07, Snowbird 2007
186. A. Węgrzynowicz, M. Derewiński "Wpływ warunków syntezy na właściwości fizykochemiczne cienkich filmów zeolitowych (typu MFI i BEA)", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IKiFP PAN Kraków 2007, p.397-398 [ISBN 978-83-60514-04-7]
187. J. Węgrzyńska, G. Para, J. Chlebicki, P. Warszyński, K. A. Wilk "Wetting Ability of Multiple Ammonium Salts", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.49
188. M. Witko, P. Hejduk "Ammonia Adsorption on  $V_2O_5$  – DFT Cluster Model Studies", Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, (4) (2007), p.563
189. M. Witko, P. Hejduk "Theoretical Description of Ammonia Adsorption at Different Low-indices  $V_2O_5$  Surfaces", Abstracts. 20<sup>th</sup> North American Catalysis Society Meeting, Houston 2007
190. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "Molybdenum Active Centers in Hetero- and Homogeneous Catalytic Systems- Description from First Principles", Abstracts. Int. Symp. on Relation between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC XIII, Berkeley 2007, p.26
191. W. Włodarczyk, A. Gaweł, K. Bahranowski, R. Janik, T. Machej, R. Dula, E. M. Serwicka "Montmorillonity podpierane tytanem lub cyrkonem jako nośniki katalizatorów do usuwania lotnych chlorowcopochodnych organicznych", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IKiFP PAN Kraków 2007, p.238 [ISBN 978-83-60514-04-7]

192. D. Wodka, A. Struska, P. Nowak "Electrocatalytic Properties of Titanium Dioxide Gels Doped with Transition Metals Ions and Prepared by Sol-gel Method", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.70
193. D. Wodka, A. Struska, P. Nowak "Elektrokatalityczne właściwości cienkich warstw TiO<sub>2</sub> dotowanego jonami metali przejściowych, otrzymanych metodą zol-żel", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.240-241 [ISBN 978-83-60514-04-7]
194. M. Zając, K. Freindl, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, N. Spiridis, J. Korecki "Structural and Magnetic Properties of Ultrathin Oxide Layers Formed on Fe(001)", Programme-Abstracts. Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007, p.119
195. J. Zawała, M. Krasowska, K. Małyśa "Influence of the Bubble Kinetic Energy on Rupture of Liquid Films at Liquid/gas and Liquid/solid Interfaces", Book of Abstracts. Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces 2007, Granada 2007, P47
196. J. Zawała, M. Krasowska, K. Małyśa "Influence of the Bubble Kinetic Energy on Rupture of Liquid Films at Liquid/gas and Liquid/solid interfaces", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.94
197. J. Zawała, K. Małyśa "Importance of the Liquid Film Size in Bubble Bouncing from Water/gas and Water/solid Interfaces", Abstract. Conf. NPCIS 2007 Nanoscale Phenomena in Colloid and Interface Science, Plovdiv 2007, p.25
198. J. Zawała, K. Święch, K. Małyśa "A Simple Physicochemical Method for Detection of Organic Contaminations in Water", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.48
199. M. Zembala, Z. Adamczyk, P. Warszynski "Electrokinetics of Surface Covered by Colloid Particles and Polyelectrolytes (Achievements and Setback)", Proc. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007, p.20
200. M. Zembala, Z. Adamczyk, P. Warszynski, A. Michna, M. Kolasieńska, M. Krasowska "Detection and Characterization of Nanoscale Surface Heterogeneity by Electrokinetic, Wettability and Deposition Measurements", Proc. Int. Workshop Nanoscale Phenomena in Colloid and Interface Science, Plovdiv 2007, p.26
201. M. Zimowiska, M. Bazarnik, K. Bahranowski, Z. Czula, J. Połtowicz, E. M. Serwicka "Charakterystyka teksturalna mezoporowatych sit molekularnych typu FSM-16 zawierających metaloorganiczne makrokompleksy", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IkiFP PAN Kraków 2007, p.359 [ISBN 978-83-60514-04-7]

202. M. Zimowska, M. Bazarnik, K. Bahranowski, Z. Olejniczak, D. Su, E. M. Serwicka "Określenie natury centrów glinowych w aluminowanych sitach molekularnych typu FSM-16 metodą MAS NMR", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IKiFP PAN Kraków 2007, p.361-362 [ISBN 978-83-60514-04-7]
203. M. Zimowska, R. Dula, J. Plona, B. Napruszewska, R. Janik, T. Machej, J. Gurgul, R. P. Socha, E. M. Serwicka "Mixed Oxide Phases Formed in the Cu-Mn-Al-O System: Nature and Role in the Catalytic Combustion of Toluene", Proc. AWPA 2007 Symp. on Air and Water Pollution Abatement, Zakopane 2007, p.151-152
204. M. Zimowska, H. Pálková, K. Bahranowski, Z. Olejniczak, E. Serwicka "Analiza procesu powstawania porowatych heterostruktur elastycznych typu PCH", Mater. 39. Ogólnopolskiego Kolokwium Katalitycznego, (ed. Ł. Mokrzycki), IKiFP PAN Kraków 2007, p.363 [ISBN 978-83-60514-04-7]
205. M. Zimowska, J. Połtowicz, R. Socha, E. M. Serwicka, M. Bazarnik, K. Bahranowski, Z. Olejniczak "Metod of Aluminatation as Mean of Controlling the Physico-chemical and Catalytical Properties of FSM-16", Book of Abstracts. 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007, P2-152

## **INNE OPRACOWANIA**

### **Ekspertyzy**

1. Ł. Bratasz "Analiza mikroklimatu groty Św. Pawła w Efezie i opracowanie koncepcji ograniczenia kondensacji wody na znajdujących się w jej wnętrzach wczesnochrześcijańskich freskach", Austriacka Misja Archeologiczna w Efezie
2. R. Kozłowski, Ł. Bratasz "Strategia konserwatorska stabilizacji klimatu Pałacu Wielkiego Mistrza", Muzeum Zamkowe w Malborku
3. R. Kozłowski, Ł. Bratasz "Diagnoza przyczyn uszkodzeń mechanicznych zabytkowej skrzyni z laki japońskiej, tzw. 'Mazarin chest', ze zbiorów Muzeum Wiktorii i Alberta w Londynie"

## **PRACE W DRUKU**

1. Z. Adamczyk, P. Weroński, J. Barbasz "Formation of Multilayered Structures in the Layer by Layer Deposition of Colloid Particles", J. Colloid Interface Sci., 317 (2008) 86-96
2. Z. Adamczyk, J. Barbasz, M. Nattich "Particle Assembly on Surfaces Bearing Circular (Dots) and Rectangular (Stripes) Surface Features", Langmuir,
3. Z. Adamczyk, J. Barbasz, M. Nattich "Deposition of Colloid Particles at Heterogeneous Surfaces", The Best of Colloid Science,
4. E. Banach, P. Kozyra, P. Rejmak, E. Brocławik, J. Datka "Cobalt Cationic Sites in Ferrierites: QM/MM Modeling", Catal. Today,

5. W. Barzyk, E. Rogalska, S. Campagna "Penetration of Antimicrobial Peptides to Phospholipid Monolayers (DPPC or DPPG) Used as Model Biological Membranes",
6. T. Borowski, M. R. A. Blomberg, P. E. M. Siegbahn "Reaction Mechanism of Apocarotenoid Oxygenase (ACO). A DFT Study", *Chem. Eur. J.*, przyjęte do druku
7. A. Burkat-Dulak, M. Derewiński "Preparation of MFI Type Zeolites with Meso-/macrovoids as New Supports for the Deposition of Metal Clusters", *Stud. Surf. Sci. Catal.*,
8. A. Burkat-Dulak, A. Jarzębski, V. Pashkova, W. Pudło, E. Włoch, M. Derewiński "Nanomaterials with a Multimodal Pore Structure Based on the MFI-Type Zeolite", *Polish J. Chem.*,
9. M. Derewiński, K. Góra-Marek, K. Lazar, J. Datka "Nature and Active Sites in the Fe-TON Zeolites: Mössbauer and IR Studies", *Stud. Surf. Sci. Catal.*,
10. D. Duraczyńska, E. M. Serwicka, A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz, Z. Olejniczak „Immobilization of Cationic Ruthenium(II) Complex Containing the Hemilabile Phosphoallyl Ligand in Hexagonal Mesoporous Silica (HMS) and Application of this Material as Hydrogenation Catalyst", *J. Organometallic Chem.*,
11. M. Elżbieciak, M. Kolasińska, P. Warszyński "Characteristics of Polyelectrolyte Multilayers: the Effect of Polyion Charge on Thickness and Wetting Properties", *Colloids Surf. A*
12. T. Fickenscher, S. Rayaprol, J. von Appen, R. Dronskowski, R. Pöttgen, K. Łątka, J. Gurgul "Crystal Structure, Chemical Bonding and Magnetic Hyperfine Interactions in GdRu<sub>2</sub>SiC", *Chem. Mater.*,
13. R. Grabowski, M. Śliwa, E. M. Serwicka, J. Skrzypek "Synteza eteru dimetylowego z gazu syntezowego", in: "Czysta energia, produkty chemiczne i paliwa z węgla - ocena potencjału rozwojowego" (ed. . Borowiecki, J. Kijeński, J. Machnikowski, M. Ściążko), Instytut Chemii Przemysłowej, Warszawa
14. M. Grzywa, W. Nitek, W. Łasocha "Synthesis, Characterization and Crystal Structure of Three Dinuclear Diperoxo Complexes of Mo(VI); K<sub>2</sub>{O[MoO(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sub>2</sub>}·2H<sub>2</sub>O, (C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>N,NH<sub>4</sub>){O[MoO(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sub>2</sub>} and (C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>N,Na){O[MoO(O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sub>2</sub>}", *J. Mol. Struct.*,
15. M. Grzywa, B. Włodarczyk-Gajda, W. Łasocha "Thermal Decomposition Study of Selected Isopolymolybdates", *Thermochimica Acta*
16. J. Gurgul, K. Łątka, A. W. Pacyna, Y. Verbovytsky, R. Pöttgen "Hyperfine Interactions Studied by <sup>119</sup>Sn Mössbauer Spectroscopy in SmRhSn", *Hyperfine Interactions*,
17. J. Gurgul, M. Rams, Ż. Świątkowska, R. Kmieć, K. Tomala "Bulk Magnetic Measurements and <sup>99</sup>Ru and <sup>155</sup>Gd Mössbauer Spectroscopies of Gd<sub>2</sub>Ru<sub>2</sub>O<sub>7</sub>", *Mössbauer Effect Reference and Data J.*,

18. W. Łasocha, A. Rafalska-Łasocha, M. Grzywa, B. Gawęł "New Achievements in X-Ray Techniques in the Investigation of Catalyst", *Catal. Today*,
19. K. Łątka, J. Gurgul, A. W. Pacyna, Y. Verbovytsky, R. Pöttgen "Mössbauer and Magnetic Characterization of TbRhSn", *Hyperfine Interactions*,
20. B. Jachimska, Z. Adamczyk, M. Wasilewska "Characterization of the Structure of BSA Using Dynamic Light Scattering, Electrophoretic Mobility and Dynamic Viscosity Measurements", *Biomolecules*,
21. Y. Jiang, B. Travis, C. Knutson, J. Zhang, P. Weroński "Numerical Methods for Protocell Simulations" in: "Protocells: Bridging Nonliving and Living matter" (eds. S. Rasmussen, M. A. Bedau, L. Chen, D. Deamer, D. C. Krakauer, N. H. Packard, P. F. Stadler), MIT Press,
22. A. Knapik, A. Drelinkiewicz, A. Waksmundzka-Góra, A. Bukowska, W. Bukowski, J. Noworól "Hydrogenation of 2-Butyne-1,4-diol in the Presence of Functional Crosslinked Resin Supported Pd Catalysts. The Role of Polymer Properties in Activity/selectivity Pattern", *Catal. Lett.*,
23. K. Kwapien, E. Broclawik "Interaction of FeO<sup>+</sup> Cation with Benzene, Aniline and 3-Methyl-aniline: DFT Study of Oxygen Insertion Mechanism", *Int. J. Quant. Chem.*,
24. K. Góra-Marek, B. Gil, M. Śliwa, J. Datka "An IR Spectroscopy Study of Co Sites in Zeolites CoZSM-5", *Appl. Catal. A*,
25. K. Małysa, K. Lunkenheimer "Foams under Dynamic Conditions", *Current Opinion Coll. Interface Sci.*,
26. P. Miśkowiec, J. Łojewska, M. Molenda, A. Lubańska, L. M. Proniewicz "Woda w celulozie – studium nad jej rodzajami i rolą w procesie degradacji" in: "Na pograniczu chemii i biologii", (ed. H. Koroniak, J. Barciszewski), Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2007
27. K. Noga, P. P. Romańczyk, A. J. Włodarczyk, E. Broclawik "Theoretical Modeling of Electrochemical Interactions in Bimetallic Molybdenum Complexes Incorporating Saturated Bridges", *Polyhedron*,
28. T. Pańczyk, T. P. Warzocha, W. Rudziński "Studies of the Collision Frequency of Ideal Gas Particles with the Surfaces of the Objects Created Using the Ballistic Deposition Technique", *Appl. Surf. Sci.*,
29. V. Pashkova, K. Góra-Marek, P. Sarv, M. Derewiński "Formation and Nature of Active sites in FAU- and BEA- Composites", *Stud. Surf. Sci. Catal.*,
30. V. Pashkova, W. Pudło, A. Jarzębski, M. Derewiński "Composite Materials Containing Zeolitic Layers Deposited on the Silica and Silica/alumina Porous Monoliths", *Stud. Surf. Sci. Catal.*,

31. S. Rasmussen, J. Bailey, J. Boncella, L. Chen, G. Collis, S. Colgate, M. DeClue, H. Fellermann, G. Goranovic, Y. Jiang, C. Knutson, P. A. Monnard, F. Mouffouk, P. Nielsen, A. Sen, A. Shreve, A. Tamulis, B. Travis, P. Weroński, J. Zhang, X. Zhou, H. Ziock, W. Woodruff, "Assembly of a Minimal Protocell" in: "Protocells: Bridging Nonliving and Living matter" (eds. S. Rasmussen, M. A. Bedau, L. Chen, D. Deamer, D. C. Krakauer, N. H. Packard, P. F. Stadler), MIT Press,
32. K. Rosół, K. Szczubiałka, B. Jachimska, Sz. Zapotoczny, M. Nowakowska, "Interaction of a Smart Cationic Polyelectrolyte Based on a Hydroxypropylcellulose with an Anionic Surfactant", *J. Appl. Polymer Sci.*,
33. M. Ruszel, B. Grzybowska, L. Kępiński, J. W. Sobczak, M. Wojciechowska "Nano Au/MgF<sub>2</sub> and Au/MgO in Oxidation of CO", *Appl. Catal.*
34. K. Samson, B. Grzybowska, J. Słoczyński, A. Kozłowska, R. Grabowski, A. Kotarba, M. Hermanowska, M. A. Bañares, E. Lozano Diz "Oxidative Dehydrogenation of Isobutane on CrO<sub>x</sub> /oxide Support Catalyst: Effect of Potassium on Physicochemical and Catalytic Properties", *J. Catal.*,
35. R. Stefanović, D. Tripković, A. Kowal, A. Tripković, V. Jovanović "Influence of Surface Morphology on Metanol Oxidation at Glassy Carbon Supported Pt Catalyst", *J. Electroanal. Chem.*,
36. T. Ślęzak, S. Stankov, M. Zając, M. Ślęzak, K. Matlak, N. Spiridis, B. Laenens, N. Planckaert, M. Rennhofer, K. Freindl, D. Wilgocka-Ślęzak, R. Ruffer., J. Korecki "Magnetism of Ultra-thin Iron Films Seen by the Nuclear Resonant Scattering of Synchrotron Radiation", *Mater. Sci.*,
37. K. Terpiłowski, M. Krasowska, E. Chibowski, K. Małysa "Influence of Teflon Surface Roughness on the Contact Angle and the Bubble Attachment in Water", *Polish J. Chem.*,
38. D. Tripković, S. Stevanović, A. Tripković, A. Kowal, V. Jovanović "Structural Effect in Electrocatalysis: Formic Acid Oxidation on Pt Electrodeposited on Glassy Carbon Support", *Science*,
39. J. Węgrzyńska, G. Para, J. Chlebicki, P. Warszyński, K. A. Wilk "The Adsorption of Multiple Ammonium Salts at the Air Solution Interface", *Langmuir*,
40. J. Załucka, P. Kozyra, M. Mitoraj, E. Broclawik, J. Datka "Cu<sup>+</sup>, Ag<sup>+</sup> and Na<sup>+</sup> Cationic Sites in ZSM-5 Interacting with Benzene: DFT Modeling", *Polish J. Chem.*,
41. J. Zawała, J. Drzymała, K. Małysa "Time of Tree Phase Contact Formation at Fluoride Surface by the Colliding Cubble", *Intern. J. Mineral Process.*,

## **KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]**

1. "Materiały XXXIX Ogólnopolskiego Kollokwium Katalitycznego, Kraków, 14-16 marca 2007" (ed. Ł. Mokrzycki), Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, Kraków 2007, pp.402 [ISBN 978-83-605514-04-7]

2. "Materiały XIV. Forum Zeolitowego, 16-21 września 2007, Kocierz - Proceedings of XIV<sup>th</sup> Zeolite Forum, 16-21 September 2007, Kocierz" (ed. V. Pashkova, M. Derewiński), Polskie Towarzystwo Zeolitowe i Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, Kraków 2007, pp.402 [ISBN 978-83-605514-05-4]

## **OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ**

### **PATENTY OTRZYMANE**

1. K. Małysa, M. Barańska, K. Lunkenheimer, G. Wienskol "Method and Procedure for Swift Characterization of Foamability and Foam Stability", Patent Europejski, EP Nr. 03 024 885.0 (udzielony 2007)
2. L. Matachowski, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber, A. Janitz, K. Magielko, S. Szarlik, S. Piechota "Sposób utleniania cykloheksanu", Patent RP, wg P.357583 (udzielony 2007)

### **LICENCJE UDZIELONE**

1. Ł. Bratasz, S. Jakiela R. Kozłowski - licencja dla Hanwell Instrument Ltd (Wielka Brytania) na produkcję czujnika do monitorowania metodą emisji akustycznej uszkodzeń obiektów zabytkowych pod wpływem fluktuacji parametrów mikroklimatycznych

### **ZGŁOSZENIA PATENTOWE**

1. R. Adzic, A. Kowal "Electrocatalyst for Alcohol Oxidation at Fuel Cell Anodes", Int. Patent Appl., No 11/853.368 (2007)
2. L. Matachowski, D. Mucha. R. Rachwalik, R. Janik " Sposób wytwarzania mikroporowatego katalizatora opartego na heteropolizwiązkach", zgłoszenie patentowe RP P-381976 (2007)

## UDZIAŁ W KONFERENCJACH NAUKOWYCH

### WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

1. Z. Adamczyk "Adsorption of Colloid Particles at Heterogenous Surfaces Bearing Sites of Various Shapes", ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007
2. Z. Adamczyk "Mechanism and Kinetics of Particle Adsorption at Interfaces: Surfactants, Proteins, Colloids", SURUZ Workshop Wetting and Surface Modification, Sudomie 2007
3. Z. Adamczyk, K. Jaszczólt "Particles at Interfaces: Interactions", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
4. A. Bielański "Kinetics and Mechanism of Gas Phase Catalytic Reactions on Solid Hetropolyacids. Case Study: Tertiary Ethers Synthesis", 8<sup>th</sup> Int. Conf. of the Romanian Catalysis Society, Bucharest 2007
5. A. Bielański "Wodór jako przyjazne środowisku paliwo przyszłości i nośnik energii", Zjazd Wiosenny Sekcji Studenckiej PTChem, Tylmanowa 2007
6. B. Grzybowska-Świerkosz, M. Ruszel "Nano Au/oxide Support Systems in Catalytic Oxidation", E-MRS Fall Meeting, Warszawa, 2007
7. J. Haber "Electronic Factors in Hydrocarbons Oxidation Catalysis", Int. Symp. in Honour of Professor Sir John Meurig Thomas "Turning Points in Solid-State Materials and Surface Science", Cambridge 2007
8. J. Korecki "Dynamics - Some Facts and Figures", Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007
9. J. Korecki "Nanostruktury metali na powierzchniach wycinalnych", I Krajowa Konf. Nanotechnologii, Wrocław 2007
10. J. Korecki "Magnetism of Ultrathin Iron Films Seen by the Nuclear Resonant Scattering of Synchrotron Radiation", Scientific Network 'New Materials for Magnetoelctronics' MAG-EL-MAT, Będlewo 2007
11. J. Korecki "Growth and Spin Structure of Ultrathin Fe Films on W(110)", Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007
12. J. Korecki "Surface Physics with Nuclear Resonant Scattering", NRS/IXS Workshop for PETRA III, Hamburg 2007
13. J. Korecki "Małe jest inne: nanocząstki złota i ich niezwykle właściwości", 39. Zjazd Fizyków Polskich, Szczecin 2007



14. R. Kozłowski "Climate-induced Damage of Wood: Numerical Modeling and Direct Tracing", Experts Roundtable on Sustainable Climate Management Strategies, The Getty Conservation Institute, Tenerife 2007
15. T. Machej "Current Trends in Development of Catalysts for VOC Emission Abatement", Konf. Emisje organických látek z technologických procesu a metody jejich snižování, Pardubice 2007
16. K. Małysa, M. Krasowska "Nanobubbles and the Three Phase Contact Formation at Hydrophobic Surfaces", Conf. NPCIS 2007 Nanoscale Phenomena in Colloid and Interface Science, Plovdiv 2007
17. G. Para, J. Węgrzyńska, K. A. Wilk, P. Warszyński "Adsorption of Multiple Cationic Surfactants at Air/solution Interface", 9<sup>th</sup> Conf. on Colloid Chemistry, Siofok 2007
18. W. Rudziński, W. Płaziński "Theoretical and Experimental Studies of Interfacial Phenomena and Their Technological Applications ", 11<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interface Phenomena and Their Technological Applications, Zamość 2007
19. E. M. Serwicka "Catalytic Reactions as Means of Catalyst Characterization", 1<sup>st</sup> Int. School on Applied Catalysis and 9<sup>th</sup> Italian Seminar on Catalysis 2007 'Characterization of Catalysts: a Key Step in the Development and Utilisation of Innovative Catalytic Systems', Bari 2007
20. E. M. Serwicka "Transnational Education in Applied Catalysis", ACENET ERA-NET Workshop 'Applied catalysis: the Key to European Prosperity and Sustainability', A Portuguese EU Presidency R&D Event, Lisbon 2007
21. L. Szyk-Warszyńska, M. Kolasińska A. Trybała, M. Zembala, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Encapsulation by Biocompatible Polyelectrolyte Multilayers"; Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
22. P. Warszyński, E. Jarek, G. Para, T. Jasiński "Adsorption of Ionic and Nonionic Surfactants – Differences and Similarities", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
23. M. Witko "Quantum Chemistry as a Tool to Study Catalytic Active Centres", IDECAT Conf. of Catalysis 'Concepts, Complexity and Diversity in Catalysis', Porquerolles 2007
24. M. Witko "Quantum Chemistry as a Nanotechnology: How to Tailor a Catalyst with Defined Properties ?", 3<sup>rd</sup> Int. Conf. on Catalysis: Fundamentals and application, Novosibirsk 2007
25. M. Witko "Surface of Transition Metal Catalysts-cluster Approach From First Principles", 1<sup>st</sup> Int. School on Applied Catalysis and 9<sup>th</sup> Italian Seminar on Catalysis 2007 'Characterization of Catalysts: a Key Step in the Development and Utilisation of Innovative Catalytic Systems', Bari 2007

26. M. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "Molybdenum Active Centers in Hetero- and Homogeneous Catalytic Systems - Description from First Principles", Int. Symp. on Relation between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC XIII, Berkeley 2007
27. M. Zembala, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Electrokinetics of Surface covered by Colloid Particles and Polyelectrolytes", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007

## REFERATY I KOMUNIKATY

1. E. Banach, P. Kozyra, P. Rejmak, E. Broćławik, J. Datka "Modelowanie QM/MM centrów kobaltowych w ferrierycie", 14. Forum Zeolitowe, Kocierz 2007
2. J. Barbasz, Z. Adamczyk "Particle Assembly on Surface Features of Various Shape", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
3. M. Bazarnik, K. Bahranowski M. Zimowska, A. Gawel, E. M. Serwicka "Silica-based Mesoporous Materials Derived from Layered Silicate-Kanemite", 8th Int. Conf. of PhD. Students and Young Scientists, Herl'any 2007
4. Ł. Bratasz "Historic Climate", Workskop COST D42 Action, Padova 2007
5. Ł. Bratasz "The CEN TC346 Draft Standard on Heating Historic Churches: an Attempt at Practical Implementation", Workskop COST D42 Action, Copenhagen 2007
6. Ł. Bratasz, R. Kozłowski "The CEN TC346 Draft Standard on Heating Historic Churches: Minimising Disturbance to the Indoor Climate", Konf. Klimagestaltung im Spannungsfeld zwischen Kulturgutschutz und Nutzerwünschen, Potsdam 2007
7. Ł. Bratasz, R. Kozłowski, D. Camuffo "Target Microclimate for Preservation Derived from Past Indoor Conditions", The Museum Microclimates Conf. , Copenhagen 2007
8. Ł. Bratasz, R. Kozłowski, S. Jakiela "Climate-induced tress in Wooden Objects: Numerical Modeling and Direct Tracing by Acoustic Emission", Workskop COST IE0601 Action, Tervuren 2007
9. Ł. Bratasz, C. Sabbioni, A. Bonazza, P. Massina, M. Cassar, P. Biddulph, P. Brimblecombe, C. M. Grossi, I. Harris, J. Tidblad, R. Kozłowski, M. Drdácý, C. Saiz-Jimenez, J. M. Gonzalez, T. Grøntoft, I. Wainwright, A. Bolea "Climate Change Impact on European Cultural Heritage", Conf. Sustainable Neighbourhood – from Lisbon to Leipzig through Research, Leipzig 2007
10. A. Bratek, Z. Adamczyk, T. Jasiński, P. Warszyński "Deposition of Particles on Polyelectrolyte Covered Surfaces", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007

11. A. Bratek, Z. Adamczyk, A. Michna, M. Zembala "Particles Deposition on Surfaces of Controlled Heterogeneity", 9<sup>th</sup> Conf. on Colloid Chemistry, Siofok 2007
12. A. Bratek, Z. Adamczyk, A. Michna, M. Zembala, M. Szaraniec "Deposition of Particles At Heterogeneous Surfaces", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ, 2007
13. T. Borowski "Reaction Mechanism of a Retinal-Forming Carotenoid Oxygenase – A DFT Study", Conf. Modeling Interactions in Biomolecules, Prague 2007
14. T. Borowski, S. de Marothy, E. Brocławik, C. J. Schofield, P. E. M. Siegbahn "Mechanism for Cyclization Reaction by Clavaminc Acid Synthase. Insights from Modeling Studies", XXXIX Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
15. E. Brocławik, T. Borowski, M. Radoń, A. R. Shaikh "Electronic and Steric Factors in Enzymatic Oxidation on Oxoferryl Iron Sites", 3<sup>rd</sup> Symposium on Theoretical Biophysics TheoBio-07, Cetraro 2007
16. E. Brocławik, T. Borowski, M. Radoń, A. R. Shaikh "Electronic and Steric Factors in Enzymatic Activity of Oxoferryl Iron Sites", 6<sup>th</sup> Central European Symp. on Theoretical Chemistry, Litschau 2007
17. A. Burkat-Dulak, V. Valtchev, M. Derewiński "Preparation of Hierarchical Micro-/Macroporous Zeolite BEA Structure", 14. Forum Zeolitowe, Kocierz 2007
18. M. Derewiński "Design of New Catalysts Based on Nanostructured Micro- and Mesoporous Solid Acids for Environmentally Clean Diesel Fuel", IDECAT Network of Excellence Workshop, WP5 'Nanoporous Materials as Tailored Reaction Space', Berlin 2007
19. M. Derewiński "Nanostructured Multimodal Porous Materials as New Effective Catalysts and Supports", IDECAT Network of Excellence Workshop, WP5 'Nanoporous Materials as Tailored Reaction Space', Berlin 2007
20. A. Drelinkiewicz "Od biomasy do Biodiesla", Konf. "Energetyka odnawialna dzis i jutro", Kraków 2007
21. D. Dronka-Góra, K. Szczepanowicz, G. Para, P. Warszyński "Investigation of Chloroform-TEOS and chloroform-APS Systems in the Presence of Surfactant Solution", SURUZ Workshop Wetting and Surface Modification, Sudomie 2007
22. R. Dula, D. Mucha, B. Napruszewska, R. Socha, E. M. Serwicka "Synteza i ewolucja termiczna związków typu hydrotalkitu zawierających jako metale strukturotwórcze Cu, Mn i Al", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
23. D. Duraczyńska, E. Serwicka, A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz "Osadzanie fosfonowego kompleksu Ru(II) na mezoporowatej krzemionce typu HMS. Badania katalityczne w reakcji uwodorniania fenyloacetyleny", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007

24. M. Elżbieciak, M. Kolasińska, P. Warszyński "Warstewki powierzchniowe, filmy Langmuira i Langmuira-Blodgetta", Warsztaty dla Młodych Naukowców SURUZ, Lublin 2007
25. M. Elżbieciak, M. Kolasińska, P. Warszyński "Wpływ gęstości ładunku polijonu na grubość i zwilżalność warstw polielektrolitów", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
26. U. Filek, B. Sulikowski "Oxidation of Norbornene over Heteropolyacids and Their Salts", 14. Forum Zeolitowe, Kocierz 2007
27. B. Gil, J. Čejka, J. Datka, B. Sulikowski "Zeolites – Supramolecular Entities of Tunable Properties", 9<sup>th</sup> Polish Supramolecular Chemistry Network Conf. Nano2007, Koninki 2007
28. A. Góra, D. A. Pacheco Tanaka, F. Mizukami, T. M. Suzuki "The Stability of the Pore Fill Type Palladium Membrane in Low Temperature Dehydrogenation of Methylocyclohexane", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
29. A. Góra, D. A. Pacheco Tanaka, J. Okazaki, F. Mizukami, T. M. Suzuki "Catalytic Dehydrogenation of Methylocyclohexane Coupled with Pore Filled Type Palladium Membranes at Temperature below 573K", PERMEA Conf., Siofok 2007
30. P. Hejduk, M. Witko "The Role of V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Low-indices Surfaces in SCR Mechanism – Cluster DFT Study of Ammonia Adsorption", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
31. B. Jachimska, Z. Adamczyk, M. Wasilewska "Charakterystyka polielektrolitów oraz białek w roztworach wodnych", I Krajowa Konf. Nanotechnologii, Wrocław 2007
32. B. Jachimska, T. Jasiński, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Chain Conformation of Linear Weak Polyelectrolyte Molecules in Electrolyte Solution: Poly(allylamine hydrochloride)", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
33. B. Jachimska, K. Onik, J. Połtowicz, K. Pamin, Z. Adamczyk, P. Warszyński, R. Grabowski "Makrocykliczne kompleksy im mobilizowane na chitanie jako katalizatory utleniania cykloalkanów", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
34. B. Jachimska, M. Wasilewska, Z. Adamczyk "Characterization of Globular Proteins: Dynamic Light Scattering, Electrophoretic Mobility and Dynamic Viscosity Measurements", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
35. B. Jachimska, M. Wasilewska, K. Szatkowska, Z. Adamczyk, G. Para "Fizykochemiczna charakterystyka białek w objętości i strukturalne przegrupowanie na powierzchni", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007

36. B. Jachimska, M. Wasilewska, Z. Adamczyk "Deposition of Particles At Heterogeneous Surfaces", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ, 2007
37. J. Janas, T. Machej, M. Che, S. Dźwigaj "Effect of the Nature of Co Species on the Catalytic Activity of CoSiBEA Zeolite in the SCR of NO", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
38. J. Janas, T. Machej, M. Che, S. Dźwigaj "Effect of the Nature of Co Species on the Catalytic Activity of CoSiBEA Zeolite in the SCR of NO by Ethanol", Int. Annual Meeting on Catalysis for Environment: Depollution, Renewable Energy and Clean Fuels, Zakopane 2007
39. J. Janas, T. Machej, J. Gurgul, R. P. Socha, M. Che, S. Dźwigaj "The Effect of Co Content on the Catalytic Activity of CoSiBEA Zeolite in the Selective Catalytic Reduction of NO with Etanol: Nature of the Cobalt Species", 14. Forum Zeolitowe, Kocierz 2007
40. T. Jasiński, F. Cuisinier, P. Warszyński, B. Jachimska, Z. Adamczyk "Chain Conformation of Poly(allylamine hydrochloride) in Electrolyte Solutions Obtained from Molecular Modeling and Viscosity Measurements", 11<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interface Phenomena and Their Technological Applications, Zamość 2007
41. T. Jasiński, B. Jachimska, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Structure of Polyelectrolyte Determined from Simulations and Viscosity Measurements: Poly(allylamine hydrochloride) (PAH)", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ, 2007
42. R. Kozłowski "Disturbance of the Climate in Historic Buildings by Heating", Warskop COST D42 Action, Padova 2007
43. R. Kozłowski "Specimens of Painted Wood for Laboratory Testing and Standardization", Warskop COST D42 Action, Copenhagen 2007
44. R. Kozłowski, Ł. Bratasz "Target Microclimates for Preservation of Wooden Objects - an Attempt at Standardisation", Warskop COST IE0601 Action, Firenze 2007
45. M. Krasowska, M. Kolasińska, P. Warszyński, K. Małysa, R. Pushkarova, R. Horn "Effect of Hydrophobicity and Surface Charge on Wetting and Time-Scale of Attachment of Bubbles to Solids", Australian Colloid and Interface Symp. ACIS2007, Sydney 2007
46. J. Łojewska, A. Lubańska, P. Miśkowiec "Model autokatalitycznej degradacji celulozy. Badania metodą in situ FTIR", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
47. M. Łukomski, Ł. Bratasz "Mapping Damage of Paint Layers on Wood by Laser Vibrometry and Thermography", Warskop COST IE0601 Action, Tervuren 2007

48. K. Małyś "Current State of the Project" Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ, 2007
49. D. Mentel, T. Machej, J. Janas, W. Rojek, M. Najbar "C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-SCR of NO over  $\gamma$ -Alumina Supported Rhodium Catalyst of Low Loading", Int. Annual Meeting on Catalysis for Environment: Depollution, Renewable Energy and Clean Fuels, Zakopane 2007
50. A. Micek-Ilnicka, B. Gil "Heteropolyacids Based Supramolecular System", 9<sup>th</sup> Polish Supramolecular Chemistry Network Conf. Nano2007, Koninki 2007
51. A. Micek-Ilnicka, B. Gil, E. Lalik "Sole diamonowe w strukturach heteropolikwasów – zastosowanie technik grawimetrycznej, FTIR i mikrokalorymetrii", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
52. Ł. Mokrzycki "Transformations of the Terpene Hydrocarbons over Zeolite Catalysts", ACENET Integrated Course on Catalysis, Kraków 2007
53. Ł. Mokrzycki, B. Sulikowski "Isomerization of  $\alpha$ -Pinene over Desilicated ZSM-12 Type Zeolites", 14. Forum Zeolitowe, Kocierz 2007
54. P. Nowak "Wykorzystanie energii słonecznej za pośrednictwem fotokatalizy na ditlenku tytanu", Konf. Programowa Małopolsko-Podkarpackiego Klastra Czystej Energii, Kraków 2007
55. P. Nowak "Doping of TiO<sub>2</sub> by Transition Metal Ions and Its Influence on the Charge Transfer Processes at the Interface TiO<sub>2</sub>/aqueous Electrolyte Solution", NIS Colloquium - Solar Energy Conversion in Nanostructured Photocatalysts, Torino 2007
56. P. Nowak, K. Laajalehto "On the Interpretation of the XPS Spectra of Adsorbed Layers of Flotation Collectors - Ethyl Xanthate on Metallic Lead", 44.Sem. Fizykochemiczne Problemy Mineralurgii, Szklarska Poręba 2007
57. A. Pacuła, R. Mokaya "As-synthesized Zeolite  $\beta$  as Template for Preparation of Porous Carbon Materials via Chemical Vapour Deposition", 14. Forum Zeolitowe, Kocierz 2007
58. A. Pacuła, R. Mokaya "Preparation of N-Doped Carbon Materials via Chemical Vapour Deposition (CVD) Method", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
59. K. Pamin, J. Połtowicz "Makrocycliczne kompleksy metali przejściowych jako katalizatory reakcji epoksydacji olefin", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
60. K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Epoxidation of Olefins Catalyzed by Monosubstituted Polyoxometalates", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
61. T. Pańczyk, W. Rudziński, "Analysis of the Adsorption Kinetics of Nitrogen on Fe(100) and Fe(111) Based on Applying the Statistical Rate Theory", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007

62. G. Para, J. Węgrzyńska, K. A. Wilk, P. Warszyński, "Effect of Multiple Charge in Adsorption of Cationic Surfactants", ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneva 2007
63. V. Pashkova, M. Derewiński "Preparation of New Acid Type Catalysts Containing Nanoclusters of Zeolites (FAU, BEA) Dispersed in Amorphous Matrix", 2<sup>nd</sup> Int. Symp. Advanced Micro- and Mesoporous Materials, Varna 2007
64. V. Pashkova, W. Pudło, E. Bielańska, Z. Czula, A. Jarzębski, M. Derewiński "Composite Materials Containing Zeolitic Layers Deposited on the Silica and Silica/alumina Porous Monoliths", 14. Forum Zeolitowe, Kocierz 2007
65. V. Pashkova, P. Sarv, L. Lityńska-Dobrzyńska, M. Derewiński "Synteza i charakterystyka układów kompozytowych zeolit/porowaty glinokrzemian, otrzymanych na drodze częściowej rekrytalizacji amorficznych ścianek glinokrzemianu", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
66. V. Pashkova, P. Sarv, M. Derewiński "Composite Porous Materials Containing Zeolitic Domains Prepared by Controlled Partial Recrystallization of Amorphous Aluminosilicates", 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007
67. W. Piasecki "Determination of the Parameters for 1-pK TLM from Known Parameters Values for 2-pK TLM", Discussion Meeting Surface Reactions and EIL, Opatija 2007
68. J. Połtowicz, K. Pamin, P. Staszyński, J. Haber, J. Noworól, W. Bukowski "Oxidative Degradation of Aromatic Pollutant in Presence of Manganese Salen Complexes", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
69. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, G. Pozzi, J. Haber "Synteza i określenie właściwości katalitycznych perfluorowanych kompleksów salenowych", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
70. R. Rachwalik, M. Hunger, B. Sulikowski "Transformations of  $\alpha$ -Pinene over Dealuminated Medium-pore Zeolite", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
71. R. Reitinger, B. Pfau, L.-M. Stadler, S. Stankov, M. Zając, N. Spiridis, B. Sepioł, F. Zontone, J. Korecki, G. Vogl "GISAXC and XPCS Studies of Islands Growth", Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007
72. R. Reitinger, B. Pfau, L.-M. Stadler, S. Stankov, F. Zontone, N. Spiridis, B. Sepioł, J. Korecki, G. Vogl "Surface Diffusion and Island Growth of Metal Films on Oxide Substrates", 57. Jahrestagung der Österreichischen Physikalischen Gesellschaft, Krems 2007
73. M. Ruszel, B. Grzybowska, M. Łaniecki, M. Wójtowski "Nanocząstki Au/Ti-silikality-SBA-15 jako katalizatory reakcji utleniania CO i węglowodorów C<sub>3</sub>", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007

74. K. Samson, B. Grzybowska, M. A. Bañares, E. Lozano Diz, J. Słoczyński, A. Kotarba, M. Hermanowska "Effect of Potassium Addition to CrO<sub>x</sub>/oxide Support Catalysts on Their Physicochemical and Catalytic Properties in Oxidative Dehydrogenation of Isobutene", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
75. L. Stadler, B. Pfau, B. Sepioł, R. Reitingner, S. Stankov, M. Zając, N. Spiridis, J. Korecki, F. Zontone, G. Vogl "Anisotropic Coarsening Dynamics Revealed by X-ray Photon Correlation Spectroscopy", Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007
76. S. Stankov, R. Röhlberger, T. Ślęzak, M. Sladeczek, B. Sepioł, G. Vogl, A. I. Chumakov, R. Ruffer, N. Spiridis, J. Łazewski, K. Parliński, J. Korecki "Phonons: from Bulk to Monolayers", Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007
77. J. Stawowska, W. M. Bartczak, A. Drelinkiewicz "Investigation of the Palladium-polyaniline System with the Methods of Computational Chemistry", 11<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interface Phenomena and Their Technological Applications, Zamość 2007
78. J. Superata "Nanostructured Hybrid Surface Layers for Hydrogen Peroxide Sensing" 2<sup>nd</sup> Network of Excellence IDECAT WP5 Workshop Nanofibrous Materials as Catalysts and Supports", Berlin 2007
79. M. Szaleniec, P. Nowak, R. Tadeusiewicz, M. Witko, J. Heider "Ethylbenzene Dehydrogenase – the Mechanism of Biocatalytic Oxidation of Alkylaromatic and Alkylheterocyclic Compounds", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
80. K. Szczepanowicz, D. Dronka-Góra, G. Para, A. M. Bouzga, C. Simon, P. Warszyński, "Micro and Miniemulsions in teos or aps Chloroform Systems as Cores for Capsules with Silica Shells"; COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
81. M. Szaleniec, T. Borowski, M. Witko, J. Heider "The Anaerobic Oxidation of Ethylbenzene Dehydrogenase – Modeling of the Mechanism", 3<sup>rd</sup> Symposium on Theoretical Biophysics TheoBio-07, Cetraro, Włochy 2007
82. M. Szaleniec, T. Borowski, M. Witko, J. Heider "The Anaerobic Oxidation of Ethylbenzene by Ethylbenzene Dehydrogenase – Modeling of the Mechanism", 3<sup>rd</sup> Symposium on Theoretical Biophysics TheoBio-07, Cetraro 2007
83. K. Szczepanowicz, D. Dronka-Góra, G. Para, A. M. Bouzga, C. Simon, P. Warszyński, "Chloroform teos and aps Emulsions as Cores for Microencapsulation"; Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
84. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, M. Zembala, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Stability of Microcapsules with Biocompatible Polyelectrolyte Shells Chitosan/alginate", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007



85. M. Śliwa, R. Grabowski "Synthesis and Physico-chemical Properties of Bifunctional Catalysts for Direct Syngas-to-dimethylether Process", Integrated Course on Catalysis, Kraków 2007
86. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Influence of Mo Coordination on Oxygen Activation in Hetero and Homogeneous Catalysts. DFT Cluster Model Studies", 71<sup>th</sup> Annual Meeting of the Deutsche Physikalische Gesellschaft and DPG Spring Meeting of the Division Condensed Matter, Regensburg 2007
87. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Deposition of Model Microcapsules at Solid Surfaces", 9<sup>th</sup> Conf. on Colloid Chemistry, Siofok 2007
88. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Deposition of Fluorescently Labelled Model Micro-capsules at Various Solid-liquid Interfaces", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
89. T. P. Warzocha, T. Pańczyk, W. Rudziński "Zależność częstotliwości zderzeń molekuł gazu doskonałego z powierzchnią od jej nieregularności", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
90. T. P. Warzocha, T. Pańczyk, W. Rudziński "Molecular Dynamics Study on Equilibrium Flux of Ideal Gas Molecules to Fractal Surface", Zjazd Wiosenny Sekcji Studenckiej PTChem, Tylmanowa 2007
91. A. Węgrzynowicz, E. Bielańska, M. Derewiński "Właściwości strukturalne membran zeolitowych typu MFI otrzymanych metodą in-situ oraz „wtórnego wzrostu", 14. Forum Zeolitowe, Kocierz 2007
92. J. Węgrzyńska, G. Para, J. Chlebicki, P. Warszyński, K. A. Wilk "Wetting Ability of Multiple Ammonium Salts", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
93. M. Witko, P. Hejduk "Amonia Adsorption on V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> – DFT Cluster Model Studies", 71<sup>th</sup> Annual Meeting of the Deutsche Physikalische Gesellschaft and DPG Spring Meeting of the Division Condensed Matter, Regensburg 2007
94. W. Witko, R. Tokarz-Sobieraj "Theoretical Description of Electronic and Geometric Structure of Some Mesogenic Molecular Complexes", 17<sup>th</sup> Conf. on Liquid Crystals - Chemistry, Physics and Applications, Augustów 2007
95. J. Zawala, J. Drzymała, K. Małysa "Natural Hydrophobicity and Flotation of Fluorite", XII Międzynarodowa Konf. Przeróbki Kopaliny, Szklarska Poręba 2007
96. J. Zawala, M. Krasowska, T. Dąbroś, K. Małysa "Influence of the Bubble Kinetic Energy on Its Bouncing During Collisions with Various Interfaces", 57<sup>th</sup> Canadian Chem. Eng. Conf., Edmonton 2007

97. J. Zawąła, M. Krasowska, K. Małyśa "Influence of the Bubble Kinetic Energy on Rupture of Liquid Films at Liquid/gas and Liquid/solid Interfaces", Int. Workshop on Bubble and Drop Interfaces 2007, Granada 2007
98. J. Zawąła, K. Małyśa "Does and How the Collision Angle Can Affects Kinetics of TPC Formation", COST P21 Meeting, Liege 2007
99. J. Zawąła, K. Małyśa "On Mechanism of the Bubble Bouncing from Water/gas Interface", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ, 2007
100. J. Zawąła, K. Małyśa "Importance of the Liquid Film Size in Bubble Bouncing from Water/gas and Water/solid Interfaces", Conf. NPCIS 2007 Nanoscale Phenomena in Colloid and Interface Science, Plovdiv 2007
101. J. Zawąła, K. Świąch, K. Małyśa "A Simple Physicochemical Method for Detection of Organic Contaminations in Water", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
102. M. Zembala, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Electrokinetics of Surface covered by Colloid Particles and Polyelectrolytes", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
103. M. Zembala, Z. Adamczyk, P. Warszyński, A. Michna, M. Kolasieńska, M. Krasowska "Detection and Characterization of Nanoscale Surface Heterogeneity by Electrokinetic, Wettability and Deposition Measurements", Int. Workshop Nanoscale Phenomena In Colloid and Interface Science, Plovdiv 2007
104. A. Zięba, A. Drelinkiewicz "Transesterification of Castor Oil as a Method of Biodiesel Production", 2<sup>nd</sup> Renew Summer School on Renewable Motor Fuels, Warszawa 2007
105. M. Zimowska, E. M. Serwicka, D. Su "Novel Catalysts Based on Organometallic Macrocycles Supported on Porous Structures Derived from Layered Minerals", IDECAT Network WP5 and WP3 Report Seminars, Berlin 2007

## **POSTERY**

1. Z. Adamczyk, J. Barbasz "Particle Deposition on Heterogeneous Surface (Surface Features)", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
2. Z. Adamczyk, P. Weroński, J. Barbasz "Layer by Layer Deposition of Colloid Particles", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
3. E. Banach, P. Kozyra, P. Rejmak, E. Broclawik, J. Datka "Cobalt Cationic Sites in Ferrierites: QM/MM Modeling", Int. Symp. on Air and Water Pollution Abatement AWWA, Zakopane 2007

4. J. Barbasz, Z. Adamczyk, M. Zembala "Nowa metoda wizualizacji nanostruktur powierzchniowych o różnych kształtach za pomocą cząstek koloidalnych", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
5. W. Barzyk, J. Superata, E. Jarek "Nauka w praniu - współdziałanie wody i surfaktantów", Int. Conf. on Chemistry at the Service of Society "Why Chemistry ?!", Kraków 2007
6. M. Bazarnik, K. Bahranowski, M. Zimowska, E. M. Serwicka "FSM-16 - Mesoporous Materials Derived from Layered Polysilicate", 9<sup>th</sup> EMU School, Munich 2007
7. A. Bratek, Z. Adamczyk, T. Jasiński, P. Warszyński "Polyelectrolyte Structures in Solution - Simulations and Measurements", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
8. A. Bratek, Z. Adamczyk, A. Michna, M. Zembala "Particle Deposition on Surfaces of Controlled Heterogeneity", 9<sup>th</sup> Conf. on Colloid Chemistry, Siofok 2007
9. A. Bratek, Z. Adamczyk, A. Michna, M. Zembala "Particle Deposition on Surfaces Covered by Polyelectrolytes", ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneva 2007
10. E. Broclawik, P. Kozyra, J. Załucka, J. Datka "Interaction of Benzene with Cu<sup>+</sup> and Ag<sup>+</sup> Sites in ZSM-5", 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007
11. A. Bukowska, W. Bukowski, J. Noworól, A. Drelinkiewicz, A. Knapik, A. Waksmundzka-Góra "Reactive Methacrylic Gels as Supports for Transition Metal Catalysts", 70<sup>th</sup> Prague Meeting on Macromolecules, Prague 2007
12. A. Burkat, M. Derewiński "Preparation of New Zeolite Supports for Bifunctional (Acid/redox) Catalysts", 2<sup>nd</sup> Int. Symp. Advanced Micro- and Mesoporous Materials, Varna 2007
13. A. Burkat, V. Valtchev, M. Derewiński "Preparatyka materiałów mikro-/makroporowatych przy wykorzystaniu zawiesin koloidalnych anionowych lateksów polistyrenowych oraz nanokryształów zeolite typu BEA", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
14. D. Dronka-Góra, k. Szczepanowicz, G. Para, P. Warszyński "Napięcie międzyfazowe układów chloroform-teos i chloroform-aps w roztworach surfaktantów - Interfacial Tension in Chloroform-teos and Chloroform-aps/surfactant Solution Systems", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
15. D. Dronka-Góra, G. Para, P. Warszyński "Adsorption Surfactants and Polyelectrolytes at Interfaces", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007

16. D. Dronka-Góra, k. Szczepanowicz, G. Para, P. Warszyński "Interfacial Properties of Chloroform-teos and chloroform-aps Surfactant Solution Systems", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
17. R. Dula, J. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "The Effect of Mn-Doping Manner on Properties of Supported and Unsupported Materials for the Catalytic Combustion of VOCs", Int. Symp. on Air and Water Pollution Abatement AWWA, Zakopane 2007
18. R. Dula, J. Janik, T. Machej, E. M. Serwicka "The Effect of Mn-Doping Manner on Properties of Supported and Unsupported Materials for the Catalytic Combustion of VOCs", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
19. R. Dula, D. Mucha, B. Napruszewska, E. M. Serwicka "Nowa procedura syntezy oraz właściwości fizykochemiczne związków typu hydrotalcytu interkalowanych anionami  $MnO_4^-$ ", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
20. R. Dula, M. Zimowska, J. Plona, B. Napruszewska, R. Socha, J. Gurgul, E. M. Serwicka "Synthesis and Thermal Evolution of Cu-Mn-Al Hydrotalcite-like Compounds", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
21. D. Duraczyńska, E. M. Serwicka, A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz "Immobilization of Hemilabile Ru(II) Complex onto Hexagonal Mesoporous Silica (HMS) and Its Catalytic Application", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
22. F. Dury, A. Klisińska, E. M. Gaigneaux "Characterization of Superficial Oxygen Vacancies of Mo-based Catalysts Used in Oxidation Reaction by the Deoxygenation of Benzoic Acid", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
23. M. Elźbieciak, M. Kolasińska, P. Warszyński "Dependence of Thickness and Wetting of Polyelectrolyte Multilayer Films on the Nature of Polyions", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
24. M. Elźbieciak, M. Kolasińska, P. Warszyński "Effect of Polyion Charge on Thickness and Wetting Properties of Polyelectrolyte Multilayers", Gordon Research Conf. Chemistry of Supramolecules & Assemblies, Il Ciocco, Barga 2007
25. M. Elźbieciak, M. Kolasińska, P. Warszyński "Effect of Polyion Charge on Thickness and Wetting Properties of Polyelectrolyte Multilayers", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
26. M. Elźbieciak, M. Kolasińska, P. Warszyński "Characteristics of Polyelectrolyte Multilayers: the Effect of Polyion Charge on Thickness and Wetting Properties" 12<sup>th</sup> Int. Conf. Organized Molecular Films (LB-12), Kraków 2007
27. U. Filek, B. Sulikowski, A. Brückner "Heteropolyacids Salts as Catalysts for the Oxidation of Norbornene", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007

28. U. Filek, B. Sulikowski, M. Hunger "A  $^{31}\text{P}$  MAS NMR Study of the Aluminium, Gallium and Indium Salts of Various Heteropolyacids", 40<sup>th</sup> Polish Seminar on Nuclear Magnetic Resonance and Its Applications, Kraków 2007
29. V. Georgiev, T. Borowski, M. R. A. Blomberg, P. E. M. Siegbahn "Dioxygen Activation in Extradiol Dioxygenases. Bf 2,3-HPCA and MndD", Annual Theoretical Chemistry Symp., Orebro 2007
30. B. Gil, J. Janas, A. Kubacka, E. Włoch, Z. Olejniczak, J. Datka, B. Sulikowski "In Quest of Active Sites for  $\text{NO}_x$  Removal over Ferrierite" 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007
31. J. Goclon, R. Gryboś, M. Witko "Reduced (010), (001) and (100) $\text{V}_2\text{O}_5$  Surfaces – Periodic DFT Study", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
32. J. Goclon, R. Gryboś, M. Witko "Reduced (010), (001) and (100) $\text{V}_2\text{O}_5$  Surfaces – Periodic DFT Study", ACENET Integrated Course on Catalysis, Kraków 2007
33. J. Goclon, R. Gryboś, M. Witko "Reduced (010), (001) and (100)  $\text{V}_2\text{O}_5$  Surfaces – Periodic DFT Studies", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
34. M. Grzywa, W. Łasocho "Chemical and Physical Investigations of Compounds of Transition Elements Containing Peroxo Groups", 9. Frühjahrssymposium, Chemnitz 2007
35. M. Grzywa, W. Nitek, W. Łasocho "Badania rentgenograficzne i fizykochemiczne związków nadtlenowych  $\text{Mo(VI)}$ ", 49 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2007
36. J. Gurgul, K. Łątka, A. W. Pacyna, Y. Verbovytsky, R. Pöttgen "Hyperfine Interactions Studied by  $^{119}\text{Sn}$  Mössbauer Spectroscopy in  $\text{SmRhSn}$ ", Int.Conf. on the Applications of the Mössbauer Effect ICAME'07, Kanpur 2007
37. J. Haber, T. Machej, M. Nattich "Katalityczny rozkład tlenku azotu (I)", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
38. J. Haber, T. Machej, M. Nattich "Influence of  $\text{NO}$  and  $\text{O}_2$  on activity of rhodium catalyst in decomposition of  $\text{N}_2\text{O}$ ", Int. Symp. on Air and Water Pollution Abatement AWPA, Zakopane 2007
39. J. Haber, P. Nowak, R. P. Socha, P. Żurek "Enhancing the Electrocatalytic Activity of  $\text{TiO}_2$  by Surface Doping with Transition Metals", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
40. P. Hejduk, M. Witko, J. Korecki, N. Spiridis "Au and Ag Adsorption at  $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  Surface: DFT Cluster Study", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
41. P. Hejduk, M. Witko "Amonia Adsorption at Low-indices  $\text{V}_2\text{O}_5$  Surfaces: DFT Cluster Study", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007

42. P. Hejduk, M. Witko "Amonia Adsorption at Low-indices V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Surfaces: DFT Cluster Study", ACENET Integrated Course on Catalysis, Kraków 2007
43. P. Hejduk, M. Witko "Amonia Activation at Low-indices V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Surfaces in SCR Reaction – Cluster DFT Study", IDECAT Conf. of Catalysis 'Concepts, Complexity and Diversity in Catalysis', Porquerolles 2007
44. P. Hejduk, M. Witko "Amonia Activation at Low-indices V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Surfaces in the SCR of NO<sub>x</sub>: DFT Cluster Study", Int. Symp. on Air and Water Pollution Abatement AWPA, Zakopane 2007
45. A. B. Hendrich, K. Pamin, J. Połtowicz "Zastosowanie znaczników fluorescencyjnych DiOC<sub>6</sub>, TMA-DPH i DPH w badaniach nad oddziaływaniem metaloporfiryn z dwuwarstwami lipidowymi", 13. Zjazd Polskiego Towarzystwa Biofizycznego, Łódź 2007
46. B. Jachimska, Z. Adamczyk, A. Karwiński, "Characterization of Polyelectrolyte Layers by the Streaming Potential Method", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
47. B. Jachimska, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Characterization of Anisotropic Molecules: Polyelectrolytes and Proteins", ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007
48. B. Jachimska, Z. Adamczyk, P. Warszyński, T. Jasiński, M. Wasilewska "Tailoring Polyelectrolyte Structure to Designing Surface for Control Protein Adsorption", 19<sup>th</sup> Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, Toulouse 2007
49. B. Jachimska, Z. Adamczyk, M. Wasilewska, M. Piotrkowski "Characterization of Globular Proteins", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
50. B. Jachimska, Z. Adamczyk, M. Wasilewska, K. Szatkowska, G. Para "Bulk and Wetting Characteristics of Globular Proteins", ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007
51. B. Jachimska, T. Jasiński, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Chain Conformation of Linear Weak Polyelectrolyte Molecules in Electrolyte Solution: Poly(allylamine hydrochloride)", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
52. B. Jachimska, M. Kolasińska, K. Pamin, J. Połtowicz, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Interaction of Metallocomplexes with Polyelectrolyte Multilayer (Chitosan/alginate)", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007

53. B. Jachimska, K. Pamin, J. Połtowicz, M. Kolasińska, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Electrostatic Immobilization of Macrocyclic Complexes by Adsorption on the External Surface of Multilayer Film: Investigation of Physico-chemical Properties", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
54. B. Jachimska, K. Pamin, J. Połtowicz, M. Kolasińska, Z. Adamczyk, P. Warszyński "Surface Tailoring for Immobilization of Macrocyclic Complexes: Investigation of Physico-Chemical Properties", 19<sup>th</sup> Int. Symp. on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, Toulouse 2007
55. B. Jachimska, J. Połtowicz, K. Pamin, Z. Adamczyk "Interaction of Metallocomplexes with Polymers (Polyelectrolytes, PAMAM Dendrimers) in Aqueous Solution", ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneva 2007
56. J. Janas, T. Machej, M. Che, S. Dźwigaj "State of Cobalt in CoSiBEA Zeolite and Its Role in NO SCR with Ethanol", 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007
57. J. Janas, T. Machej, J. Gurgul, R. P. Socha, M. Che, S. Dźwigaj "Effect of the Nature of Co Species on the Catalytic Activity of CoSiBEA Zeolite in SCR of NO by Ethanol", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
58. T. Jasiński, F. Cuisinier, P. Warszyński "Molecular Dynamics Simulations of Polyelectrolytes: Effect of Force Field Parameters on the Conformations and Effective Charge", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
59. K. Jaszczólt, Z. Adamczyk, P. Weroński "Kinetics of Particle Deposition on Heterogeneous Surfaces", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
60. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Utlenianie cyklooktanu w obecności soli kwasu fosforowolframowego z jonami metali przejściowych wprowadzonymi w pozycję addenda" 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
61. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Sole tetrabutylamoniowe lakunarnych heteropolikwasów jako katalizatory utleniania fenoli", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
62. R. Karcz, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Liquid Phase Phenol Oxidation in the Presence of Different Salts of Heteropolyacids", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
63. H. Karhu, D. Chichova, R. P. Socha, I. J. Väyrynen "Co-adsorption of Carbon Monoxide and Nitric Oxide on Platinum Single Crystal Surfaces", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
64. T. Kasza, A. Stokłosa "Wpływ właściwości fizykochemicznych nośników na aktywność fotokatalityczną osadzonych na nich cienkich warstw TiO<sub>2</sub>", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007

65. A. Klisińska, S. Derclaye, A.-S. Mamede, E. M. Gaigneaux "Spin-coating of Mo-based Model Catalysts for Scanning Probe Microscopy AFM", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
66. A. Klisińska, P. Eloy, M. J. Genet, H. Poelman, K. Eufinger, D. Poelman, R. De Gryse, G. B. Marin, E. M. Gaigneaux "Applicability of XPS Imaging to Non-flat Model Vanadia-titania Catalysts", 12<sup>th</sup> European Conf. on Applications of Surface and Interface Analysis ECASIA'07, Brussels 2007
67. A. Klisińska-Kopacz, E. M. Gaigneaux "Effect of the Nature of the Precursor on the Morphology of MoO<sub>3</sub> Thin Films Spin-coated on Si(100)", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
68. A. Klisińska-Kopacz, E. M. Gaigneaux "Efficient Way of Bismuth, Cobalt and Nickel Molybdates Model Catalysts Preparation by Spin-coating", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
69. A. Knapik, A. Waksmundzka-Góra, A. Bukowska, W. Bukowski, J. Noworól, A. Drelinkiewicz "Pd-Gel Type Functional Resins, the Catalysts for Hydrogenation of Regents with Unsaturated C≡C and C=C Bonds", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
70. A. Knapik, A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz, J. Noworól, A. Bukowska, W. Bukowski "Pd-funkcjonalizowane żywice – katalizatory dla uwodorniania alkynów", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
71. A. Knapik, A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz, J. Noworól, A. Bukowska, W. Bukowski "Functional Gel-type Resin – Pd Catalysts for Hydrogenation of Alkyne Reagents", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
72. A. Kotarba, W. Rożek, I. Serafin, M. Grzywa, P. Kuśtrowski, Z. Sojka "From Solid State Model of Doped Potassium Ferrites towards Robust Iron Oxide Catalyst Design", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
73. A. Kowal, Kug-Seung, Sung Jong Yoo, P. Olszewski, Jung-Eun Sung " Synthesis and Properties of Pt-Rh, Pt-SnO<sub>2</sub> and Pt-Rh-SnO<sub>2</sub> Electrocatalysts for Etanol Oxidation", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
74. A. Krowiak, W. Turek, J. Haber "Ocena mocy centrów kwasowych na podstawie reakcji dehydratacji alkoholu izopropylowego do propenu", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
75. A. Król, J. W. Sobczak, A. Drelinkiewicz "Katalityczne właściwości Pd-polianilina i Pd/poli(4-winylopirydyna) w uwodornianiu 2-butyne-1,4-diolu", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
76. A. Król, A. Waksmundzka-Góra, A. Zięba, J. W. Sobczak, A. Drelinkiewicz "Polyaniline and Poly(4-vinylpyridine) Supported Pd and Pt Catalysts. Role of Polymer in Hydrogenation of 2-Butyne-1,4-diol", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007



77. M. Krzan, J. Zawala, K. Malysa "Dynamic Structure of Adsorption Layer over Interface of the Bubble Rising in Protein Solutions", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ, 2007
78. A. Kubacka, J. Janas, E. Wloch, B. Sulikowski "Selective Catalytic Reduction of Nitrogen Oxide Using Methane on Ferrierite Catalysts", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
79. A. Kubacka, B. Sulikowski, Z. Wang, V. Cortés Corberán "Direct Oxidation of Benzene to Phenol in the Presence of O<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> over Pd- and Pt/(V)MCM-41", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
80. E. Kukulska-Zajac, P. Kozyra, I. Dzwigaj, J. Zalucka, E. Broclawik, J. Datka "Properties of Ag<sup>+</sup> Ions in Zeolites and Their Interaction with Adsorbed Molecules. IR Study and DFT Calculations", 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007
81. Ł. Lasyk, M. Lukomski, Ł. Bratasz "Mapping Climate-induced Damage of Paint Layers on Wood by Electronic Speckle Pattern Interferometer (ESPI)", Warskopol COST IE0601 Action, Firenze 2007
82. Ł. Lasyk, M. Lukomski, Ł. Bratasz "3D Laser Scanning of 'Christ Blessing the Children' by Lucas Cranach the Elder", Warskopol COST IE0601 Action, Tervuren 2007
83. A. Leśniak, Z. Adamczyk, M. Nattich, J. Barbasz "Nanoworld", Int. Conf. on Chemistry at the Service of Society "Why Chemistry ?!", Kraków 2007
84. W. Łasocha, A. Rafalska-Łasocha, M. Grzywa, B. Gaweł "New Achievements in X-Ray Techniques in the Investigations of Catalyst", Int. Symp. on Air and Water Pollution Abatement AWWA, Zakopane 2007
85. W. Łasocha, M. Grzywa, A. Rafalska-Łasocha, B. Gaweł "X-ray Powder Diffraction Methods in the Investigations of Fibrillar Trimolybdates", 24<sup>th</sup> European Crystallographic Meeting, Marrakech 2007
86. W. Łasocha, A. Rafalska-Łasocha, M. Grzywa, B. Gaweł "Badania trójmolibdenianów amin przy użyciu metod dyfraktometrii proszkowej", 49 Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław 2007
87. W. Łasocha, A. Rafalska-Łasocha, M. Grzywa, B. Gaweł, W. Nitek "Complex Structures of Simple Molybdates", 24<sup>th</sup> European Crystallographic Meeting, Marrakech 2007
88. K. Łatka, J. Gurgul, A. W. Pacyna, Y. Verbovytsky, R. Pöttgen "Mössbauer and Magnetic Characterization of TbRhSn", Int. Conf. on the Applications of the Mössbauer Effect ICAME'07, Kanpur 2007
89. A. Łukaszczyk, E. Wloch, Z. Żurek, B. Sulikowski "Synthesis of Ferrierite Coatings on the FeCrAl Steel Substrate", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007

90. T. Machej, R. Janik, J. Lenard, H. Sadowska, B. Napruszewska, E. Serwicka-Bahranowska, M. Zimowska "Katalizator monolityczny do neutralizacji zanieczyszczeń organicznych", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
91. T. Machej, R. Janik, H. Sadowska, E. Serwicka-Bahranowska, K. Bahranowski, W. Włodarczyk "Katalizator do pełnego utleniania chlorowcopochodnych", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
92. D. Mentel, T. Machej, J. Janas, W. Rojek, M. Najbar "Badanie redukcji NO węglowodorami aromatycznymi i alifatycznymi na katalizatorze 0.06Rh/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> w obecności tlenu", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
93. D. Mentel, T. Machej, J. Janas, W. Rojek, M. Najbar "HC-SCR of NO over Alumina Supported Rhodium Catalyst of Low Loading", Int. Symp. on Air and Water Pollution Abatement AWWPA, Zakopane 2007
94. A. Micek-Ilnicka "Kinetyka i mechanizm syntezy eteru etylo-tert-butyłowego na heteropolikwasie H<sub>6</sub>P<sub>2</sub>W<sub>18</sub>O<sub>62</sub> w obecności wody w fazie gazowej", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
95. A. Micek-Ilnicka "Gas Phase Synthesis of Ethyl-tert-butyl ether (ETBE) in the System: Ethanol, Isobutene and Water on Heteropolyacid H<sub>6</sub>P<sub>2</sub>W<sub>18</sub>O<sub>62</sub> as the Catalyst", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
96. A. Michna, M. Szaraniec, Z. Adamczyk "Characterization of Polyelectrolyte Layers by the Streaming Potential Method", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
97. Ł. Mokrzycki, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Isomerization of  $\alpha$ -Pinene over ZSM-12, ZSM-5 and MCM-22 Zeolites", 40<sup>th</sup> Polish Seminar on Nuclear Magnetic Resonance and Its Applications, Kraków 2007
98. Ł. Mokrzycki, B. Sulikowski "Dealumination of Zeolite Y Using H<sub>4</sub>EDTA and Its Properties in the Isomerization of  $\alpha$ -Pinene", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
99. Ł. Mokrzycki, B. Sulikowski "Isomerization of  $\alpha$ -Pinene on ZSM-12 Type Zeolite", - Recent Research Report, 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007
100. M. Nattich, J. Haber, T. Machej "Modyfikacja katalizatora rodowego w reakcji rozkładu tlenu azotu (I)", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
101. M. Nowakowska, K. Rosół, K. Szczubiałka, B. Jachimska, Sz. Zapotoczny "Removal of Anionic Surfactants from Water Using Cationic Polyelectrolytes", ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007

102. A. Pacuła, J. Kryściak-Czerwenka, K. Pamin, E. M. Serwicka "Porównanie właściwości fizykochemicznych i katalitycznych układów zawierających  $H_3PW_{12}O_{40}$  osadzony na wodorowej formie montmorillonitu", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
103. A. Pacuła, R. Mokaya "Hydrogen Storage Capacity of Carbon Materials Prepared via Chemical Vapour Deposition Using As-synthesised Zeolite  $\beta$  as Template", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
104. A. Pacuła, R. Mokaya "Synthesis of Porous Carbon Materials via Chemical Vapour Deposition Using As-synthesized Zeolite  $\beta$  as Template", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
105. K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Wpływ monopodstawionej metalami przejściowymi struktury lakularnej kwasu na aktywność i selektywność reakcji utleniania węglowodorów cyklicznych", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
106. H. Pálková, M. Zimowska, Z. Olejniczak, E. M. Serwicka "Alumination of Porous Clay Heterostructures Prepared from Synthetic Trioctahedral Smectite via Templating Process", EUROCLAY Conf., Aveiro 2007
107. G. Para, P. Warszyński "Effect of Divalent Ions on Adsorption of Cethyltrimethylammonium Salts", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
108. E. Partyka-Janowska, B. Sepioł, M. Sladeczek, D. Kmiec, J. Korecki, T. Ślęzak, M. Zając, R. Ruffer, S. Stankov, G. Vogl "Nuclear Resonant Scattering Studies of Relaxation in Fe-Monolayer on W(110)", Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007
109. V. Pashkova, M. Derewiński "Synteza i charakterystyka układów kompozytowych BEA/amorficzny glinokrzemian", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
110. J. Plona, M. Zimowska, R. Janik, T. Machej, E. Serwicka-Bahranowska "Nanostrukturalne katalizatory na osnowie tlenków miedzi i manganu do usuwania lotnych zanieczyszczeń organicznych", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
111. W. Płaziński, W. Rudziński, "Application of the statistical rate theory to describe the kinetics of adsorption at solid/solution interfaces", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
112. J. Połtowicz, K. Pamin, P. Staszyński, J. Haber, J. Noworól, W. Bukowski "Badanie właściwości katalitycznych manganowych kompleksów salenowych w reakcji utleniania związków alochtonicznych", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007

113. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, J. Haber "Badanie aktywności katalitycznej ftalocyjanin kobaltu, żelaza i manganu fizykochemicznych różnymi podstawnikami fizykochemicznych pierścieniu fizykochemicznych reakcji utleniania węglowodorów tlenem molekularnym", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
114. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, J. Haber "Influence of Substituents in Metallophthalocyanine Complexes on Their Catalytic and Electrochemical Properties in Oxidation of Cycloalkanes", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
115. J. Połtowicz, K. Pamin, E. Tabor, G. Pozzi, J. Haber "Synteza i określenie właściwości katalitycznych perfluorowanych kompleksów salenowych", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
116. R. Rachwalik, Z. Olejniczak, B. Sulikowski "Alumination of Ferrierite: Its Influence on the Physicochemical and Catalytic Properties", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
117. R. Rachwalik, B. Sulikowski "How the Silanization Affects Catalytic Properties of Zeolite L ?", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
118. H. Raeder, Ch. Simon, J. Yang, A. Garcia, G. Pierre, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Preparation of Hollow Nanosized Silica Composite Capsules", Conf. Technology for Better Society, Oslo 2007
119. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha "Modern Applications of X-Rays in the Investigations of Art Objects", 50 Jubileuszowy Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
120. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, A. Jasińska "Can Art Be a Source of Knowledge for Scientists?", Int. Conf. on Chemistry at the Service of Society "Why Chemistry ?!", Kraków 2007
121. A. Rafalska-Łasocha, W. Nitek, M. Grzywa, B. Gawel, W. Łasocha "Synthesis and structural Investigations of Organoammonium Octamolybdates", 50. Jubileuszowy Zjazd PTChem i SITPChem, Toruń 2007
122. P. Rejmak, E. Broclawik "NO Molecule Interaction with Cu(I) Sites in Faujasite-combined Quantum Mechanics/molecular Mechanics Study", 15<sup>th</sup> Int. Zeolite Conf., Beijing 2007
123. K. Rosół, K. Szczubiałka, Sz. Zapotoczny, B. Jachimska, M. Nowakowska "Novel Smart Cationic Polyelectrolyte Based on a Hydroxypropylcellulose - Interactions with an Anionic Surfactant", 3<sup>rd</sup> Young European Scientists Workshop YES 2007, Kraków 2007
124. W. Rudziński, T. Pańczyk, T. P. Warzocha, Collision Frequency of Ideal Gas Particles with Irregular Surfaces as a Function of Their Fractal Dimension. Molecular Dynamic Studies", 11<sup>th</sup> Polish-Ukrainian Symp. on Theoretical and Experimental Studies of Interface Phenomena and Their Technological Applications, Zamość 2007

125. M. Ruszel, B. Grzybowska, M. Łaniecki, M. Wójtowski "Au Nanoparticles Dispersed on Ti-SBA-15 Supports as the Catalysts in Oxidation of CO and of C<sub>3</sub> Hydrocarbons", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
126. D. Rutkowska-Żbik, T. H. Rod, U. Ryde "Opracowanie metodologii teoretycznego wyznaczania wartości pKa i potencjału redox w proteinach", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
127. D. Rutkowska-Żbik, M. Witko, G. Stochel "Pochodne chlorofilu – badania właściwości katalitycznych i przydatności do terapii fotodynamicznej", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
128. K. Samson, I. Gressel, B. Grzybowska-Świerkosz, A. Kotarba, M. Hermanowska "Utleniające odwodornienie izobutanu na domieszkowanych potasem układach tlenków chromu i wanadu na nośnikach tlenkowych", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
129. J. Słoczyński, R. Grabowski, A. Kozłowska, M. Śliwa "Interaction of Oxygen with the Surface of Vanadia Catalysts", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
130. R. P. Socha, A. V. Tripković, P. Nowak, A. Kowal "Surface Composition of PtBi Electrode Cycled in Sulfuric Acid", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
131. N. Spiridis, K. Freindl, T. Ślęzak, M. Ślęzak, M. Zając, J. Korecki "Fe Nanostructures on W(110) and W(540)", Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007
132. J. Stawowska, W. M. Bartczak, A. Drelinkiewicz "Investigation of the Palladium-polyaniline System with the Methods of Computational Chemistry", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
133. J. Stawowska, W. M. Bartczak, A. Drelinkiewicz "Investigation of the Palladium-4-vinylpyridine and Palladium-poly(4-vinylpyridine) Systems with the Methods of Computational Chemistry", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
134. A. Struska, D. Wodka, P. Nowak "Electrocatalytic Properties of Titanium Dioxide Gels Doped with Nickel Ions. Comparison with Nickel Hydroxide", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
135. J. Superata, I. Janowska, P. Warszyński "Microelectrode Surface Modification with Carbonaceous Nanostructured Hybrid Composite Sensing Layers", EMRS Fall Meeting, Warszawa 2007
136. M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider "Ethybenzene Dehydrogenase – Biosynthesis of Secondary Alkylaromatic and Alkylheterocyclic Alcohols", Int. Symp. on Relation between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC XIII, Berkeley 2007

137. M. Szaleniec, M. Witko, J. Heider "Ethybenzene Dehydrogenase – Biosynthesis of Secondary Alkylaromatic and Alkylheterocyclic Alcohols", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
138. K. Szczepanowicz, D. Dronka-Góra, G. Para, A. M. Bouzga, C. Simon, P. Warszyński, "Emulsion Containing Silica Sources as a Cores for Microencapsulation", ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneve 2007
139. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, P. Warszyński "Permeability of Polyelectrolyte Shells for Fluorescein Containing Microcapsules Suspended in Solution and Attached to a Surface", 9<sup>th</sup> Conf. on Colloid Chemistry, Siofok 2007
140. L. Szyk-Warszyńska, A. Trybała, P. Warszyński "Deposition of Fluorescently Labelled Model Microcapsules at Steel Surface", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
141. M. Śliwa, R. Grabowski " Synthesis and Physico-chemical Properties of Bifunctional Catalysts for Direct Syngas-to-dimethylether Process" Industrial Catalytic Processes Course, Bath 2007
142. E. Tabor, K. Pamin, J. Połtowicz, J. Haber "Comparison of Catalytic Activity of Monomeric Metallorphyryns, Their  $\mu$ -Oxo Analogues and Supported Complexes in Oxidation of Cyclooctane", Int. Symp. on Relation between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC XIII, Berkeley 2007
143. E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, P. Nowak, J. Haber "Wpływ struktury i właściwości elektrochemicznych metaloporfiryn na ich właściwości katalityczne w reakcji utleniania cyklooktanu", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
144. E. Tabor, J. Połtowicz, K. Pamin, G. Pozzi, J. Haber "Synthesis and Physico-chemical Characterization of Perfluoroalkylated Salen Complexes", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
145. R. Todorov, J. Zawała, K. Małyśa, D. Exerowa "Foam Films from Serum Albumine", Conf. NPCIS 2007 Nanoscale Phenomena in Colloid and Interface Science, Plovdiv 2007
146. R. Tokarz-Sobieraj "Theoretical Description of Molybdena Based Catalysts; DFT Cluster Model Study", 20<sup>th</sup> North American Catalysis Society Meeting, Houston 2007
147. R. Tokarz-Sobieraj, R. Gryboś, M. Witko "Electronic Structure of MoO<sub>2</sub>. DFT Periodic and Cluster Studies", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
148. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "Wpływ liganda i stopnia utlenienia Mo na proces aktywacji tlenu na porfirynach molibdenowych", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
149. R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko "DFT Cluster Model Studies of Oxygen Activation at Molybdenum Porphyrins and Molybdenum Trioxide", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007

150. A. Trybała, D. Dronka-Góra, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Co to są nanokapsułki?", Int. Conf. on Chemistry at the Service of Society "Why Chemistry ?!", Kraków 2007
151. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński "Permeability of Polyelectrolyte Shells for Fluorescein Containing Microcapsules Suspended in Solution and Attached to a Surface", ECIS 2007, 21<sup>st</sup> Conf. of the European Colloid and Interface Society, Geneva 2007
152. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Permeability of Polyelectrolyte Shells of Fluorescein Containing Microcapsules Suspended in Solution and Attached to a Surface", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
153. A. Trybała, L. Szyk-Warszyńska, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Permeability of Polyelectrolyte Shells for Fluorescein Containing Microcapsules Suspended in Solution and Attached to a Surface", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
154. A. Waksmundzka-Góra, A. Drelinkiewicz, J. W. Sobczak, J. Stejskal "Hydrogenation of 2-Ethylanthraquinone on Pd-Polyaniline (SiO<sub>2</sub>)-Composites", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007
155. A. Waksmundzka-Góra, A. Zięba, A. Knapik, J. W. Sobczak, A. Drelinkiewicz "Fizykochemiczne i katalityczne właściwości układów Pt-polianilina i Pt-poli(4-winylopirydyna)", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
156. E. Wenda, A. Bielański "Diagram fazowy układu V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-MoO<sub>3</sub>-Ag<sub>2</sub>O", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
157. P. Weroński, Z. Jiang, S. Rasmussen "Application of Molecular Dynamics Simulations in the Design of a Minimal Self-Replicating Molecular Machine", 27<sup>th</sup> Annual CNLS Conf. Complexity of Biological and Soft Materials, Santa Fe, 2007
158. P. Weroński, Z. Jiang, S. Rasmussen "Application of Molecular Dynamics Simulations in the Design of a Minimal Self-Replicating Molecular Machine", 4<sup>th</sup> Annual Conf. on Foundations of Nanoscience: Self-Assembled Architectures and Devices FNANO'07, Snowbird 2007
159. A. Węgrzynowicz, M. Derewiński "Wpływ warunków syntezy na właściwości fizykochemiczne cienkich filmów zeolitowych (typu MFI i BEA)", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
160. J. Węgrzyńska, G. Para, J. Chlebicki, P. Warszyński, K. A. Wilk, "Adsorption Mechanism of Multiple Ammonium Salts at the Air Solution Interface", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007
161. J. Węgrzyńska, G. Para, J. Chlebicki, P. Warszyński, K. A. Wilk "Wetting Ability of Multiple Ammonium Salts", Int. SURUZ Conf. Surfactants and Dispersed Systems in Theory and Practice, Książ 2007

162. M. Witko, P. Hejduk "Theoretical Description of Ammonia Adsorption at Different Low-indices  $V_2O_5$  Surfaces", 20<sup>th</sup> North American Catalysis Society Meeting, Houston 2007
163. W. Włodarczyk, A. Gaweł, K. Bahranowski, R. Janik, T. Machej, R. Dula, E. M. Serwicka "Montmorillonity podpierane tytanem lub cyrkonem jako nośniki katalizatorów do usuwania lotnych chlorowcopochodnych organicznych", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
164. D. Wodka, A. Struska, P. Nowak "Elektrokatalityczne właściwości cienkich warstw  $TiO_2$  dotowanego jonami metali przejściowych, otrzymanych metodą zol-żel", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
165. D. Wodka, A. Struska, P. Nowak "Electrocatalytic Properties of Titanium Dioxide Gels Doped with Transition Metals Ions and Prepared by Sol-gel Method", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
166. M. Zając, K. Freindl, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, N. Spiridis, J. Korecki "Structural and Magnetic Properties of Ultrathin Oxide Layers Formed on Fe(001)", Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007
167. M. Zając, K. Freindl, K. Matlak, M. Ślęzak, T. Ślęzak, N. Spiridis, J. Korecki "CEMS Studies of Ultrathin Fe Films on MgO(001)", Workshop on Nano-Scale Materials: Growth-Dynamics-Magnetism, Grenoble 2007
168. P. Zarzycki "Molecular Dynamics Study of Water Structure. Classical and Quantum Rigid Water Model", The 2007 Berkeley Mini Statistical Mechanics Meeting, Berkeley 2007
169. J. Zawała, M. Krasowska, K. Małysa "Influence of the Bubble Kinetic Energy on Rupture of Liquid Films at Liquid/gas and Liquid/solid Interfaces", COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 2007
170. A. Zięba, A. Drelinkiewicz "Transesterification as a Method of Biodiesel Production", Integrated Course on Applied Catalysis, Kraków 2007
171. A. Zięba, T. Kasza, A. Bielański, A. Drelinkiewicz "Wytwarzanie bioestrów (Biodiesel) w procesie katalitycznej transestryfikacji olejów roślinnych", Int. Conf. on Chemistry at the Service of Society "Why Chemistry ?!", Kraków 2007
172. M. Zimowiska, M. Bazarnik, K. Bahranowski, Z. Czula, J. Połtowicz, E. M. Serwicka "Charakterystyka teksturalna mezoporowatych sit molekularnych typu FSM-16 zawierających metaloorganiczne makrokompleksy", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007



173. M. Zimowska, M. Bazarnik, K. Bahranowski, Z. Olejniczak, D. Su, E. M. Serwicka "Określenie natury centrów glinowych w aluminowanych sitach molekularnych typu FSM-16 metodą MAS NMR", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
174. M. Zimowska, R. Dula, J. Plona, B. Napruszewska, R. Janik, T. Machej, J. Gurgul, R. P. Socha, E. M. Serwicka "Mixed Oxide Phases Formed in the Cu-Mn-Al-O System: Nature and Role in the Catalytic Combustion of Toluene", Int. Symp. on Air and Water Pollution Abatement AWWA, Zakopane 2007
175. M. Zimowska, Z. Olejniczak, E. M. Serwicka, M. Bazarnik, K. Bahranowski "<sup>27</sup>Al MAS NMR and <sup>29</sup>Si MAS NMR Study of Kanemite Precursor of FSM-16 Mesoporous Sieves", EUROCLAY Conf., Aveiro 2007
176. M. Zimowska, H. Pálková, K. Bahranowski, Z. Olejniczak, E. Serwicka "Analiza procesu powstawania porowatych heterostruktur ilastych typu PCH", 39. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 2007
177. M. Zimowska, J. Połtowicz, R. Socha, E. M. Serwicka, M. Bazarnik, K. Bahranowski, Z. Olejniczak "Metod of Aluminatation as Mean of Controlling the Physico-chemical and Catalytical Properties of FSM-16", 8<sup>th</sup> European Congr. on Catalysis EuropaCat-8, Turku 2007

## **WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH**

1. J. Barbasz "Struktura i morfologia powierzchni a adsorpcja CO na Au/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001)", Zakład Fizyki Statystycznej, Instytut Fizyki, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2007
2. J. Barbasz "Mono- i wielowarstwowe struktury hierarchiczne o kontrolowanej architekturze", Zakład Fizyki Statystycznej, Instytut Fizyki, Uniwersytet Jagielloński, Kraków 2007
3. T. Borowski "Mechanism for Cyclization Reaction by Clavaminc Acid Synthase. Insights from Modeling Studies", Faculty of Chemistry FU, Berlin 2007
4. T. Borowski "Electrostatic Calculations for [Ni,Fe]-Hydrogenase", Faculty of Chemistry FU, Berlin 2007
5. E. Brocławik "Theoretical Modeling of Metal Active Sites in Zeolites", Tohoku University, Sendai 2007
6. E. Brocławik "Electronic and Steric Factors in Enzymatic Oxidation on Oxyferryl Iron Sites: Challenges for Quantum Chemistry", Lund University, Lund 2007
7. J. Haber, M. Nattich, T. Macchj "Alkali-metal Promoted Rhodium-on-alumina Catalyst for Nitrous Oxide Decomposition", Université Pierre et Marie Curie Paris VI, Paris 2007

8. J. Haber "The Nobel Prize in Chemistry 2007", Krakowskie Konwersatorium Fizyczne UJ, Kraków 2007
9. J. Haber "The Nobel Prize in Chemistry 2007", Wydział III PAN, Warszawa 2007
10. P. Hejduk "Katalizator widziany oczami teoretyka", Koło Studentów Chemii UMCS, Lublin 2007
11. J. Korecki "Druga młodość (anty-)efektu Mössbauera: Fonony w skali nano"; Zakład Fizyki Ciała Stałego, Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski, Warszawa 2007
12. J. Korecki "Jądrowe, rezonansowe rozpraszanie promieniowania synchrotronowego, czyli druga młodość efektu Mössbauera", Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, Kraków 2007
13. J. Korecki "Rezonansowe rozpraszanie promieniowania synchrotronowego, a badania fononów", Katedra Fizyki WMiFS, Politechnika Rzeszowska, Rzeszów 2007
14. A. Kowal "Pt/Rh/SnO<sub>2</sub> - a New Anode for Direct Ethanol Fuel Cell ?", Seoul National University, Seoul 2007
15. A. Kowal "New Catalyst for Electrochemical Oxidation of Etanol: Pt/Rh/SnO<sub>2</sub>", IHTM Institute of Electrochemistry, Belgrade University, Belgrade 2007
16. R. Kozłowski "W sercu Mony Lizy", Seminarium Konserwatorskie, Muzeum Narodowe, Kraków 2007 (seria 3 wykładów)
17. R. Kozłowski "Pomiary mikroklimatu w obiektach zabytkowych", Seminarium Konserwatorskie, Muzeum Narodowe, Kraków 2007
18. M. Krzan, K. Małysa "Interrelations between Development of a Dynamic Structure of Adsorption Layer and Local Velocities of Rising Bubbles", GRASP Group for Research and Analysis in Statistical Physics, Liege University, Liege 2007
19. M. Krzan, S. Cohen-Addad, R. Höhler, M. Marinic "Rheology and Stability of Particle Laden Aqueous Foams", GRASP Group for Research and Analysis in Statistical Physics, Liege University, Liege 2007
20. W. Łasocha, A. Rafalska-Łasocha "Chemical Applications of the Powder Diffraction", National Autonomous University of Mexico, Mexico City 2007
21. M. Łukomski "Sukiennice – zamek w Niepołomicach. Przeprowadzka stulecia", Seminarium Konserwatorskie, Muzeum Narodowe, Kraków 2007
22. A. Rafalska-Łasocha, W. Łasocha, A. Jasińska "Chemistry and Art Objects", National Autonomous University of Mexico, Mexico City 2007
23. M. Ruszel "Au Nanoparticles on Oxide Supports as Catalysts in Oxidation of CO and of Hydrocarbons", Fritz-Haber Institute MPG, Berlin 2007

24. B. Sulikowski "Properties of Zeolites and Remarks on Their Modifications", Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, CSIC, Madrid 2007
25. M. Szaleniec "Dehydrogenaza etylobenzenowa. Beztlenowa hydroksylacja związków alkiloaromatycznych i alkiloheterocyklicznych. Teoria i eksperyment", Wydział Biochemii Lekarskiej Collegium Medicum UJ, Kraków 2007
26. P. Warszyński "Multilayer Polyelectrolyte Structures", Faculty of Technology, Tomas Bata University, Zlin 2007
27. P. Weroński, M. Kolasińska, J. Barbasz, Z. Adamczyk "New Approach to Modeling Multilayer Irreversible Adsorption of Charged Nanospheres", Department of Chemical and Materials Engineering, University of Cincinnati, Cincinnati 2007.

## WYKŁADY DLA STUDENTÓW I DOKTORANTÓW

1. A. Bielański "Kondensacja jonów w roztworze wodnym: olacja i oksolacja", wykład dla studentów II roku chemii UJ - 1 godzina
2. T. Borowski "Chemia kwantowa makrocząsteczek", ćwiczenia dla III roku biofizyki UJ - 30 godzin
3. E. Broclawik "Struktura, spektroskopia i oddziaływania", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN - 14 godzin
4. E. Broclawik "Modelowanie molekularne materiałów", wykład monograficzny w panelu "nowe materiały i kataliza" dla Wydziału Chemii UJ - 30 godzin
5. E. Broclawik "Chemia kwantowa makrocząsteczek", wykład kursowy dla kierunku biofizyka w Instytucie Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii UJ - 30 godzin
6. E. Broclawik "Stosowana chemia kwantowa", wykład monograficzny dla doktorantów Środowiskowego Studium Doktoranckiego Wydziału Chemii UJ - 30 godzin
7. M. Derewiński "Wstęp do spektroskopii w podczerwieni i Ramana", wykłady dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN – 4 godziny
8. A. Drelinkiewicz "Termodynamika", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN - 32 godziny
9. B. Grzybowska-Świerkosz "Podstawy katalizy heterogenicznej i mechanizmy głównych reakcji katalitycznych", wykłady dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN - 15 godzin
10. B. Grzybowska-Świerkosz "Oxidation Reactions on Nano-oxide and Nano-metal (Au) Species Dispersed on Oxide Supports", wykłady dla studentów V roku i doktorantów Dipartimento di Chimica Industriale e dei Materiali, Università di Bologna - 5 godzin

11. B. Jachimska "Zaawansowane techniki analityczne, metoda dynamicznego rozpraszania światła (DLS), pomiary wielkości cząstek koloidalnych", wykłady dla IV roku Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH - 2 godziny
12. B. Jachimska "Zaawansowane techniki analityczne, Laser Doppler Velocimetry, pomiary ruchliwości elektroforetycznej cząstek koloidalnych", wykłady dla IV roku Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH - 2 godziny
13. B. Jachimska "Zaawansowane techniki analityczne, charakterystyka układów koloidalnych", zajęcia laboratoryjne w IKiFP PAN - 2 godziny
14. J. Korecki, pensum dydaktyczne AGH
15. J. Korecki, wykłady dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN
16. A. Kowal, Seminarium i zajęcia praktyczne dotyczące technik AFM i STM z wykorzystaniem mikroskopu Nanoscope DI, University of Estern Sarajevo, Departament of Technology, Zvornik - 20 godzin
17. A. Kowal, Seminarium i zajęcia praktyczne dotyczące technik AFM i STM z wykorzystaniem mikroskopu Nanoscope DI, Instytut Elektrochemii ICTM, Uniwersytet Belgradzki, Belgrad - 36 godzin
18. a. Kowal, konsultacja prac doktorskich J. Lović i S. Terzić z Instytutu Elektrochemii ICTM, Uniwersytet Belgradzki, Belgrad - 2 tygodnie
19. A. Lubańska "Chromatografia gazowa – podstawy metody i jej zastosowania oraz test katalityczny", wykład i ćwiczenia dla uczniów Technikum Chemicznego, współpraca z Zakładem Metodyki Nauczania Chemii Wydziału Chemii UJ – 18 godz.
20. W. Łasocha "Dyfrakcja rentgenowska", wykład i egzamin dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN – 4 godziny
21. W. Łasocha "Fizykochemia ciała stałego i metody badań", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN – 4 godziny
22. P. Nowak "Elektrochemia półprzewodników", wykład monograficzny dla studentów Wydziału Chemii UJ - 15 godzin
23. P. Nowak "Elektrochemia", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN – 4 godziny
24. P. Nowak "Elektrochemia, metody fizykochemiczne badania katalizatorów", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IKiFP PAN – 4 godziny
25. E. Serwicka-Bahranowska "Zastosowanie EPR do badania minerałów ilastych", wykład na Wydziale Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska AGH - 5 godzin

26. B.Sulikowski "Fizykochemia ciała stałego", wykłady i egzamin dla studentów IV roku, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej, 15 godzin
27. B.Sulikowski "Fizykochemia ciała stałego", wykłady i egzamin dla doktorantów, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej, 15 godzin
28. P. Warszyński "Chemia fizyczna", wykład dla słuchaczy Międzynarodowego Studium Doktoranckiego IkiFP PAN – 14 godzin

### **ACENET Integrated Course of Applied Catalysis**

1. E. Broclawik "Catalysts Characterization – Theoretical Modeling"
2. E. Broclawik "Kinetics and Reaction Mechanisms - Mechanistic Cycles"
3. A. Drelinkiewicz "Fundamentals of Catalytic Reactions"
4. P. Nowak "Electrocatalysis"
5. E. M. Serwicka "Catalyst Characterization"

## **SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU**

### **WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI**

1. M. Asztemborska (Instytut Chemii Fizycznej PAN, Warszawa) "Rozróżnianie enancjomerów monoterpenuidów w chromatografii gazowej"
2. P. Bahadur (Department of Chemistry, University of South Gurajat, Surat) "Block Copolymers - the Versatile Multiphase Polymeric System with Potential Applications"
3. K. Burda (Instytut Fizyki UJ, Kraków, Instytut Fizyki Jądrowej PAN, Kraków)"Zagadka fotosyntezy"
4. N. Kruse (Université Libre de Bruxelles) "Catalysis on the Nanoscae"
5. W. Makowski (Wydział Chemii UJ, Kraków) "Zastosowanie równowagowej termodesorpcji n-alkanów jako metody badań zeolitów i materiałów mezoporowatych"
6. S. Motilla (University of Turku) "Surface Studies of Metal Chalcogenides"
7. P. Pencakowski (Akademia Sztuk Pięknych, Kraków) "Co przedstawia kamienny krucyfiks Wita Stwosza w Kościele Mariackim w Krakowie ?" - wykład wielkanocny
8. S. Rodziński (Akademia Sztuk Pięknych, Kraków) "Tajemnica procesu twórczego. Pomiędzy wzruszeniem i rygiorem" - wykład bożonarodzeniowy

9. P. Ruiz (Catholic University, Louvain-la-Neuve) "New Concepts Concerning the Activation of CO<sub>2</sub> and Advances in Catalytic Processes Dedicated to Energetic Production"
10. K. Sadlej (Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, Warszawa) "Opór hydrodynamiczny agregatów cząstek - teoria i przykłady obliczeń numerycznych"
11. M. Staszak (Politechnika Poznańska) "Symulacja dynamiki zmian powierzchni międzyfazowej metodą objętości skończonych w układzie oktan-woda wraz z weryfikacją eksperymentalną"
12. W. Taborski (GlaxoSmithKline, Poznań) "Wykorzystanie lasera do znakowania kapsułek miękkich"

### WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. J. Barbasz "Ilościowy opis nieodwracalnej adsorpcji cząstek koloidalnych na powierzchniach heterogenicznych"
2. Burkat-Dulak, V. Pashkova, A. Węgrzynowicz M. Derewiński "Monodispersyjne, koloidalne zawiesiny nanokryształów zeolitów i ich wykorzystanie jako prekursorzy w preparatyce nowych układów dla procesów katalitycznych i rozdziału"
3. Burkat-Dulak, V. Pashkova, A. Węgrzynowicz M. Derewiński "Membrany i układy o multimodalnej strukturze porowatej"
4. A. Drelinkiewicz "Od biomasy do biochemikalii"
5. A. Drelinkiewicz, T. Kasza, A. Zięba "Układy metal-polimer w katalizie"
6. M. Grzywa "Hybrydowe organiczno-nieorganiczne materiały warstwowe: synteza i badania strukturalne i fizykochemiczne"
7. M. Grzywa "Stałe superkwasy oraz nowe perokso związki Mo(VI), W(VI) i V(V) - synteza"
8. J. Janas "Centrum Ekspertyz Zanieczyszczeń Środowiska - nowe laboratorium Instytut"
9. R. Karcz "Synteza i badania właściwości katalitycznych kompleksów metali przejściowych w procesie utleniania węglowodorów"
10. M. Łukomski "Monitorowanie stanu powierzchni obiektów zabytkowych przy zastosowaniu metod optycznych"
11. A. Micek-Ilnicka "Kinetyka i mechanizm syntezy eteru etylo-tert-butyłowego (ETBE) z etanolu i izobutenu w układzie uwodnionym"
12. Ł. Mokrzycki "Synteza i właściwości nowych katalizatorów zeolitycznych do procesów transformacji węglowodorów alkiloaromatycznych i terpenowych"

13. P. Nowak "Elektrokataliza w ogniwach paliwowych"
14. A. Pacuła "Synthesis of Carbon Materials via Chemical Vapour Deposition (CVD) Using Different Templates"
15. P. Rejmak "Metale przejściowe jako centra aktywne w zeolitach i enzymach: modelowanie metodami chemii kwantowej"
16. W. Rojek "Katalityczne utlenianie sadzy samochodowej"
17. M. Ruszel, K. Samson, M. Śliwa "Badania statutowe zespołu Kataliza II"
18. B. Sulikowski, U. Filek, Ł. Mokrzycki, R. Rachwalik, E. Włoch "Synteza i właściwości nowych katalizatorów zeolitowych do procesów transformacji węglowodorów alkiloaromatycznych i terpenowych"
19. B. Świątkowska "7. Program Ramowy Unii Europejskiej"

#### **WYKŁADY DNIA OTWARTEGO INSTYTUTU**

1. A. Bielański, "Woda - związek bardzo pospolity"
2. J. Haber "Energia - warunek rozwoju ludzkości"
3. K. Małyś "Flotacja i tańczące pęcherzyki"
4. D. Rutkowska-Żbik "Jak teoretyk widzi katalizator ?"
5. J. Szaleniec, M. Szaleniec "Zobaczyć niewidzialne. Chemia i fizyka w medycznej diagnostyce obrazowej"

#### **WYKŁADY POPULARNO-NAUKOWE**

1. J. Barbasz "Chemia wody", Krakowskie Stowarzyszenie Akwarystów, Instytut Botaniki UJ, Kraków 2007
2. J. Barbasz "Morskie inaczej", Krakowskie Stowarzyszenie Akwarystów, Galeria Przyrody, Kraków 2007
3. A. Bielański, "Węgiel - pierwiastek o stu twarzach", 8 Festiwal Nauki, Kraków 2007
4. Drelinkiewicz "Biomasa, biodiesel, biochemikalia", 8 Festiwal Nauki, Kraków 2007

## NADANE STOPNIE I TYTUŁY NAUKOWE

### PROFESORA

1. Bogdan Sulikowski
2. Wiesław Łasocha (Wydział Chemii UJ)

### DOKTORA HABILITOWANEGO

1. R. Grabowski "Modelowanie kinetyki utleniającego odwodornienia alkanów na katalizatorach tlenkowych"
2. W. Piasecki "Opis równowag i kinetyki adsorpcji jonów prostych na granicy faz tlenek metalu/roztwór elektrolitu oparty na modelu jednostopniowej protonacji powierzchni tlenku oraz statystycznej teorii transportu międzyfazowego"

### DOKTORA

1. S. Jakiela "Emisja akustyczna drewna w obiektach zabytkowych pod wpływem fluktuacji klimatu" (promotor R. Kozłowski)
2. T. Kasza "Badanie właściwości fotokatalitycznych i charakterystyka fizykochemiczna nanokrystalicznych filmów TiO<sub>2</sub> na podłożu ceramicznym" (Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej PK)
3. A. Michna "Mechanizm oddziaływania cząstek koloidalnych z powierzchniami heterogenicznymi wyznaczony przy pomocy badań adsorpcji oraz zjawisk elektrokineetycznych" (promotor Z. Adamczyk)
4. M. Nattich "Mechanizm działania katalizatora Rh w reakcji rozkładu podtlenku azotu" (promotor J. Haber)
5. K. Samson "Utleniające odwodornienie izobutanu na domieszkowanych układach tlenków chromu i wanadu na nośnikach tlenkowych" (promotor B. Grzybowska-Świerkosz)
6. M. Szaleniec "Ethylbenzene Dehydrogenase - Biocatalytic Oxidation of Aromatic and Alkylaromatic Compounds" (promotor M. Witko)
7. E. Tabor "Porównanie właściwości katalitycznych metaloporfiryn i ich  $\mu$ -oxo kompleksów w procesach utleniania węglowodorów" (promotor J. Haber)
8. A. Waksmundzka-Góra "Wpływ właściwości nośników polimerowych na aktywność katalizatorów palladowych w uwodornianiu związków karbonylowych", (Wydział Chemii UJ)



## **KONFERENCJE I IMPREZY NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE**

1. 39. Ogólnopolskie Kollokwium Katalityczne, Kraków 14-16 marca 2007.  
(B. Sulikowski)
2. COST D43 Workshop Functional Interfaces – Theory and Experiment & SURUZ  
Workshop Surfactants and Dispersed Systems, Kraków 19-21 marca 2007  
(Z. Adamczyk)
3. ACENET Integrated Course on Applied Catalysis, Kraków, 26-30 marca 2007  
(E. Serwicka-Bahranowska)
4. IDECAT Workshop "From Idea to Results - Effective Research Project Management",  
Kraków, 14-15 czerwca 2007 (M. Witko)
5. Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 16 października 2007 (M. Derewiński)
6. Workshop "New Colloidal Systems for Nano and Biotechnology", Kraków, 15-16  
listopada 2007 (B. Jachimska)

## WYPIS Z PROTOKOŁU POSIEDZENIA RADY NAUKOWEJ IKiFP PAN

### Wypis 52

**z protokołu z VII posiedzenia Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w dniu 21 lutego 2008 roku, dotyczący „Sprawozdania z działalności Instytutu w 2007 r.”.**

### **8. Sprawozdanie z działalności Instytutu w 2007 r.**

Przewodnicząca Rady Naukowej prof. M. Nowakowska poprosiła z-cę dyrektora Instytutu ds. naukowych, prof. E. Serwicką-Bahranowską, o przedstawienie sprawozdania z działalności Instytutu w 2007 r. Członkowie Rady mieli możliwość zapoznania się z istotnymi elementami sprawozdania zawartymi w informacji przekazanej uprzednio drogą elektroniczną. W sprawozdaniu prof. E. Serwicka-Bahranowska omówiła różne aspekty działalności Instytutu z perspektywy ostatnich kilku lat. Na wstępie przedstawiła sprawozdanie finansowe Instytutu. W pierwszym punkcie zaprezentowała dochody Instytutu w postaci dotacji statutowej. Przypomniała, że w 2007 roku Instytut otrzymał dotację statutową w wysokości ok. 5 mln zł, i gdyby nie dodatkowa dotacja uzyskana w grudniu tegoż roku w wysokości 1 mln zł, to Instytut znalazłby się w katastrofalnej sytuacji finansowej.

Prof. E. Serwicka zwróciła uwagę, że dotacja statutowa jest tylko jednym, chociaż bardzo ważnym sposobem finansowania w strukturze dochodów Instytutu, dzięki czemu Instytut może prosperować pomimo trudnej sytuacji finansowej. Inne źródła finansowania to:

– projekty badawcze krajowe i zagraniczne, współpraca naukowa i naukowo-techniczna z zagranicą, patenty, licencje, zlecenia, działalność operacyjna, operacje finansowe.

Razem uzyskana kwota ta wynosiła w roku 2007 ok. 20 mln zł, z czego dotacja statutowa stanowiła zaledwie ok. 25%. Jeśli chodzi o wydatki, to osobowy fundusz płac praktycznie odpowiada wysokości dotacji statutowej, znaczną kwotę w wysokości ok. 5 mln zł wykorzystaliśmy na zakup nowej aparatury (kwota ta zawiera ok. 3 mln dotację na aparaturę uzyskaną pod koniec 2006 r.). Ze względu na posiadanie przez Instytut dużej ilości drogiej aparatury rośnie równocześnie kwota związana z jej utrzymaniem. Wzrastająca ilość grantów powoduje równoczesny wzrost innych pozycji np. materiałów, energii itp.

Następnie prof. E. Serwicka przedstawiła, w jaki sposób na przestrzeni ostatnich lat zmieniał się udział różnych źródeł finansowania w budżecie Instytutu. Poziom dotacji statutowej jest stały począwszy od 2006 r. W ubiegłym roku otrzymaliśmy dodatkowo 1 mln zł, ale na bieżący rok została przyznana dotacja w tej samej wysokości, co w roku ubiegłym, czyli 4 982 000 zł. Jeśli chodzi o inne źródła finansowania, prof. E. Serwicka stwierdziła, że od 2004 roku obserwuje się intensywny wzrost udziału grantów ministerialnych (własnych, promotorskich, habilitacyjnych), grantów ministerialnych (sieci) oraz bardzo istotnie zasilających finanse grantów zagranicznych i tzw. SPUB-ów. Obecnie Instytut zatrudnia 105 osób, z czego 88 osób jest zatrudnionych przy badaniach naukowych. W tej grupie 48 osób to pracownicy naukowci; w tym pracownicy samodzielni stanowią 18 osób. W ostatnich latach obserwujemy dynamiczny wzrost zatrudnienia młodej kadry, czyli osób ze stopniem doktora poniżej 35 roku życia (23 osoby), którzy stanowią obecnie ok. 22% ogółu zatrudnionych. Ze względu na prowadzone Studium Doktoranckie mieliśmy w 2007 r w Instytucie 22 doktorantów.

Przedstawiając dorobek naukowy Instytutu, prof. E. Serwicka podkreśliła ciągły wzrost wskaźnika ilości publikacji przypadających na jednego pracownika naukowego, który w bieżącym roku osiągnął wysoką wartość 3,54 , przy wysokiej ogólnej ilości publikacji

(170). Wzrosła również liczba cytowań, choć nie należy oczekiwać natychmiastowego przełożenia ostatnich osiągnięć badawczych na wzrost liczby cytowań.

Prof. E. Serwicka przedstawiła dynamikę wzrostu ilości grantów będącą wyznikiem naszej aktywności w pozyskiwaniu dodatkowych źródeł finansowania. Stwierdziła, że w ostatnich latach obserwuje się wyraźny trend wzrostowy, jeśli chodzi o liczbę grantów w Instytucie, szczególnie projektów własnych, promotorskich i zagranicznych. Zwróciła uwagę, że liczba grantów w niektórych kategoriach przekracza liczbę pracowników samodzielnych, a zatem część z nich prowadzona jest przez młodszych pracowników naukowych. Sytuacja ta wskazuje, że dochodzimy do punktu wysycenia, a wielu kolegów twierdzi, że obciążenie związane z koniecznością pozyskiwania środków pieniężnych staje się niekorzystne dla prowadzonych badań naukowych.

O rozwoju Instytutu świadczy również rozwój kadry naukowej; w ubiegłym roku jako Instytut zyskaliśmy dwie profesury, dwie habilitacje i osiem prac doktorskich. Potwierdzeniem skuteczności badań Instytutu jest również uzyskany w bieżącym roku jeden patent i jedno zgłoszenie patentowe.

Łączny dorobek naukowy w 2007 r. obejmuje 2 książki: (a) podręcznik „*Podstawy chemii nieorganicznej*” prof. A. Bielańskiego, (b) praca „*Obszary międzyfazowe*” przygotowana przez prof. A. Pomianowskiego; ponadto 2 artykuły przeglądowe oraz 110 artykułów w czasopiśmie o cyrkulacji międzynarodowej.

Z kolei prof. E. Serwicka-Bahranowska zaprezentowała tematykę badań statutowych prowadzonych w Instytucie. Obejmują one 6 głównych kierunków, związanych z katalizą, fizykochemią powierzchni oraz ochroną dziedzictwa kultury. Następną grupę tematów stanowią projekty własne, finansowane w postaci grantów ministerialnych. Instytut realizuje aktualnie 19 projektów własnych, z których 5 rozpoczęto w 2007 r. oraz 11 projektów promotorskich, z których 3 zapoczątkowane w 2007 r. Są osoby, które mają więcej niż jednego doktoranta, jak prof. J. Haber, doc. M. Derewiński. Prof. E. Serwicka nadmieniła także, że w 34 konkursie Ministerstwa zakończonym w lipcu 2007 roku z ramienia Instytutu złożono 15 projektów, a 5 z nich uzyskało finansowanie. Na 35 konkurs złożono 7 wniosków. Prof. E. Serwicka zwróciła także uwagę na pojawienie się wśród kierowników nowych projektów pracowników naukowych ze stopniem doktora, co, jak wynika z dotychczasowych doświadczeń, było bardzo trudne do uzyskania w Ministerstwie. Pozostałe projekty to grant habilitacyjny dr T. Borowskiego, trzy projekty badawcze typu POL.POST.DOC II, dwa projekty badawcze zamawiane (w przypadku jednego z nich jesteśmy koordynatorem projektu) oraz nowy Projekt Inicjatywy Technologicznej, który będzie realizowany w ścisłej współpracy z przemysłem.

Inne rodzaje finansowania to dwie Krajowe Sieci Naukowe: „MANAR Nowe nanomateriały warstwowe o kontrolowanej architekturze i funkcjonalności” oraz „EKO-KAT Innowacyjne materiały katalityczne w ochronie ekosystemu” i dwa Projekty Sektorowych Programów Operacyjnych Europejskich Funduszy Strukturalnych.

Z kolei prof. E. Serwicka omówiła projekty badawcze finansowane przez instytucje zagraniczne, tj. projekty 6 Programu Ramowego UE - 10 projektów, będące również istotnym źródłem finansowania.

Prof. E. Serwicka zwróciła uwagę, że oprócz korzyści wynikających bezpośrednio z finansowania projektów, w przypadku wielu z nich mamy dodatkowe finansowanie ze strony

Ministerstwa (w postaci tzw. SPUB-ów). Oprócz tego wymieniła 4 projekty typu COST, które nie są finansowane przez instytucje zagraniczne, natomiast pozwalają na finansowanie w ramach Ministerstwa, tak jak w przypadku projektu *Colloid and Interface Chemistry for Nanotechnology* prof. Z. Adamczyka. Oprócz tego 2 projekty mechanizmu finansowego EOG (tzw. „mechanizm norweski”), i 5 innych projektów o charakterze bilateralnym.

Na zakończenie przeglądu projektów badawczych przedstawiła uzyskany przez grupę prof. J. Habera patent „Sposób utleniania cykloheksanonu”, oraz jedno zgłoszenie patentowe.

Wybrane najważniejsze osiągnięcia zespołów Instytutu w ubiegłym roku to:

1. Patent „Sposób utleniania cykloheksanu” wg P-357583, udzielony 28. 12. 2007  
*L. Matachowski, J. Poltowicz, K. Pamin, J. Haber, A. Janitz, K. Magielko, S. Szarlić, S. Piechota*
2. Czujnik emisji akustycznej do bezpośredniego monitorowania uszkodzeń obiektów zabytkowych, *Ł. Bratasz, S. Jakiela, R. Kozłowski*
3. Określenie kinetyki tworzenia oraz struktury monowarstw cząstek koloidalnych oddziaływujących potencjałem krótkozasięgowym, *Z. Adamczyk, A. Bratek, A. Michna, J. Barbasz*
4. Ilościowy opis adsorpcji surfaktantów kationowych typu gemini na swobodnej powierzchni roztworów, *G. Para, M. Noworyta, P. Warszński.*

Jeśli chodzi o stopnie i tytuły naukowe, które zostały przyznane w Instytucie w ubiegłym roku, prof. E. Serwicka wymieniła: tytuł naukowy profesora nauk chemicznych, uzyskany przez doc. dr hab. inż. Bogdana Sulikowskiego (IKFP PAN), oraz drugi tytuł naukowy profesora nauk chemicznych, uzyskany przez doc. dr hab. Wiesława Łasochę (poprzez Wydz. Chemii UJ); dwie habilitacje, dr Ryszarda Grabowskiego i dr Wojciecha Piaseckiego, oraz osiem doktoratów, wśród których większość została przeprowadzona w naszym Instytucie, natomiast doktorat p. A. Waksmundzkiej-Góry został przeprowadzony na Wydz. Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego.

Choć Instytut zasadniczo ma charakter badawczy, cenimy sobie również wszelkie możliwości wykonywania pracy dydaktycznej. I tak w 2007 r. siedem osób wykonywało w Instytucie pracę magisterską z Wydz. Chemii UJ. Przyjęto ponadto dwóch praktykantów. Nasi pracownicy prowadzą wykłady dla Studium Doktoranckiego (11 osób, w sumie 254 godz. wykładów), a także wykłady poza Instytutem (13 osób, 194 godz. wykładów).

Omawiając współpracę międzynarodową, prof. E. Serwicka-Bahranowska zauważyła, że przez współpracę międzynarodową należy rozumieć również współpracę w ramach wyżej wymienionych grantów zagranicznych. Wynikiem współpracy międzynarodowej były 43 publikacje w czasopiśmie o obiegu międzynarodowym, co stanowi ok. 25 % wszystkich publikacji, 8 materiałów konferencyjnych, oraz 34 doniesienia w materiałach konferencyjnych.

Instytut był organizatorem lub współorganizatorem 7 konferencji naukowych (o różnym stopniu ważności), m.in. **XXXIX Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne**, konferencja popularna w całej Polsce, która w ostatnim okresie osiągnęła znakomity poziom, jeśli chodzi o stronę organizacyjną i reprezentacyjną. W bieżącym roku będziemy organizować XL Kolokwium Katalityczne połączone z 40-leciem istnienia Instytutu.

Na zakończenie swego wystąpienia prof. E. Serwicka-Bahranowska podkreśliła, jak ważne dla Instytutu jest upowszechnianie nauki, jej popularyzacja w najszerszym znaczeniu tego słowa. W ramach tej działalności na ostatni (szósty) „Dzień Otwarty Instytutu”, który odbył się 16 października 2007 r., przygotowaliśmy 6 wykładów popularnonaukowych (każdy powtarzany dwukrotnie), oraz 20 stanowisk, gdzie prezentowano różne eksperymenty związane z prowadzonymi badaniami. Bardzo pozytywnym objawem jest to, że niektóre wykłady prowadzili młodzi pracownicy. Prof. M. Nowakowska przypomniała, że Instytut uczestniczył również w konferencji popularno-naukowej „Why chemistry” w Krakowie, której organizatorem był prof. Jerzy Haber.

Przewodnicząca Rady Naukowej prof. M. Nowakowska podziękowała prof. E. Serwickiej za przedstawienie dorobku Instytutu oraz „Sprawozdania z działalności za rok 2007”, po czym otworzyła dyskusję nad *Sprawozdaniem*. Prof. J. Korecki zwrócił uwagę na bardzo niskie wartości dotacji statutowych. Odnosząc się do wypowiedzi prof. J. Koreckiego, prof. M. Witko przedstawiła tabelę nakładów na 1 osobę w różnych jednostkach ogłoszoną przez Ministerstwo Nauki w 2006 r., stwierdzając równocześnie, że w 2007 r. wysokości nakładów nie uległy znaczącej zmianie:

|                             |            |
|-----------------------------|------------|
| Inst. Chemii Organicznej    | 128 977 zł |
| Inst. Chemii Fizycznej      | 98 665 zł  |
| Inst. Chemii Bioorganicznej | 92 754 zł  |
| IK i FP                     | 76 935 zł  |
| Inst. Inżynierii Chemicznej | 74 000 zł  |
| Centrum Badań Molekularnych | 70 000 zł  |

Ostatnia ocena, która miała miejsce ok. 10 lat temu i skutkowałą przyznaniem większej dotacji Instytutowi, nie była do tej pory korygowana, jeśli chodzi o nowe nakłady środków pieniężnych. Natomiast w bieżącym roku zaznaczono, że Instytut nie otrzyma w 2008 r. więcej pieniędzy. Innymi słowy oznacza to, że otrzymane środki finansowe w ramach dotacji statutowej wystarczą tylko do września b.r. Prof. A. Bielański wyraził nadzieję, że w razie ewidentnych braków Instytut otrzyma więcej pieniędzy pod koniec roku.

Prof. M. Witko wyjaśniła, że pieniądze, które przychodzą z końcem roku, są co prawda dotacjami statutowymi, ale ukierunkowanymi np. na zakup aparatury, przez co nie rozwiązują problemów braków finansowych. Prof. J. Haber zwrócił uwagę, że warszawskie instytuty naukowe otrzymują większe finansowanie, gdyż w czasach komunizmu koordynowały problemy węzłowe, na co przeznaczone były dodatkowe kwoty pieniężne.

Prof. K. Małyśa poprosił, aby na posiedzeniu następnej Rady Naukowej udostępnić tabelę uposażeń w poszczególnych grupach, ponieważ wysokości uposażeń w Instytucie (np. adiunkta – 2000 brutto), są znacznie niższe niż w uczelniach. Prof. Z. Żurek stwierdził, że średnia pensja adiunkta na Wydz. Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej wynosi brutto 3100 zł. Prof. Z. Żurek wyraził wątpliwość, czy Ministerstwo ma świadomość poważnych trudności finansowych jednostek badawczych, jeśli te nie zgłaszają problemów, natomiast za wszelką cenę starają się, aby otrzymane pieniądze wystarczyły przynajmniej na podstawowe potrzeby. Mówi się bowiem wyraźnie, że do tej puli, którą na dziś Ministerstwo przeznaczyło na finansowanie Uczelni, mają dołączyć szkoły prywatne.

Prof. J. Haber zwrócił uwagę na kolejny problem współpracy z przemysłem. Prof. M. Witko powiedziała, że centralnie zostały powołane dwa zespoły, które mają zakończyć pracę do końca marca: jeden zajmujący się karierą naukową pracowników nauki, drugi zajmujący się

modelem nauki. W zespołach tych poszczególne jednostki badawcze mają swoich przedstawicieli. Przedstawiciel Polskiej Akademii Nauk zajął jednakże stanowisko stwierdzające, że instytuty badawcze powinny otrzymywać 30% finansowania statutowego, a pozostałe środki finansowe powinny sobie wypracować we własnym zakresie. Prof. J. Haber zwrócił także uwagę, że fundusze powinny być rozdysponowywane przez dyrektora instytutu, a nie ukierunkowywane przez Ministerstwo.

Prof. M. Nowakowska poprosiła o skierowanie dyskusji najpierw na problem oceny samego sprawozdania, a potem kwestie finansowania. Prof. Z. Żurek pogratulował osiągnięć Instytutowi i wyraził zdziwienie, jak w tej sytuacji finansowej Instytut sobie radzi.

Wobec braku dalszych głosów odnośnie oceny „Sprawozdania” przewodnicząca Rady Naukowej prof. M. Nowakowska zaproponowała jawne głosowanie nad przyjęciem uchwały, że Rada jest zadowolona z działalności Instytutu w 2007 r. Rada Naukowa jednogłośnie przyjęła sprawozdanie do akceptującej wiadomości.

Prof. M. Nowakowska wracając do dyskusji nad sytuacją finansową stwierdziła, że Rada może jedynie zaopiniować ewentualny wniosek Dyrekcji do Ministerstwa, ponieważ istnieje realne zagrożenie zakłócenia działalności podstawowej jednostki. We wniosku należałoby wykazać, że jednostka zrobiła wszystko, co leży w jej mocy, aby uzyskać środki z zewnętrznych źródeł finansowania. Należy też wykazać nadmierne obciążenie pracowników tą działalnością i podać fakt, że wszystkie dostępne źródła finansowania zostały wykorzystane. Zaproponowała, aby Rada wypracowała swoją opinię, która będzie wspierała wniosek Pani Dyrektora prof. M. Witko z prośbą o przekazanie dodatkowych funduszy na działalność Instytutu. Członkowie Rady Naukowej w jawnym głosowaniu przyjęli ten wniosek.

Za zgodność z protokołem

Prof. dr hab. inż. Bogdan Sulikowski  
Sekretarz Rady Naukowej IKiFP PAN